中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

强关联系统中两阶段过程的数值研究

作者姓名：胡丹青

指导教师：杨义峰 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别：理学博士

学科专业：理论物理

培养单位：中国科学院物理研究所

2020 年 9 月

Numerical study of the two-stage process in the strongly correlated systems

A dissertation submitted to the

University of Chinese Academy of Sciences

in partial fulfillment of the requirement

for the degree of

Doctor of Natural Science

in Theoretical Physics

By

Hu Danqing

Supervisor: Professor Yang Yifeng

Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences

September, 2020

中国科学院大学
学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日　　期：

中国科学院大学
学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：　　导师签名：

日　　期：　　日　　期：

摘 要

近几十年来，强关联电子系统一直都是凝聚态物理中最重要的研究方向之一。在强关联电子系统中，电子间的库仑相互作用很强，使得系统展现出非常丰富的物理性质。强关联电子系统通常是一些包含未填满的 d 或 f 电子壳层的单质或者化合物，如巨磁阻锰氧化物、重费米子化合物、铜氧化物高温超导体等等都属于强关联电子系统。

由于强的电子间相互作用，基于单电子近似的传统能带论以及密度泛函理论不再能够很好描述系统的性质。因此人们发展出一系列新的理论以及计算方法，如严格对角化方法、数值重整化群、密度矩阵重整化群、量子蒙特卡罗、动力学平均场等等。利用这些方法对一些强关联系统模型进行数值研究得到了非常多重要的结果，使我们更深刻得理解其中的物理图像。本文主要介绍强关联系统中的主要模型和数值计算方法，包括直接处理晶格模型的行列式量子蒙特卡罗方法，通过将晶格模型映射成等效单杂质模型然后自洽迭代求解的动力学平均场方法，以及两种杂质求解器——数值重整化群与杂化展开连续时间量子蒙特卡罗。

最近基于 $CeCoIn_5$ 的超快激光泵浦-探测实验中观察到的反常的准粒子软化行为，人们提出了两阶段的杂化图像。在本论文的第一个工作中，我们通过行列式量子蒙特卡罗方法研究了半满周期性 Anderson 模型中的杂化涨落。通过对杂化关联函数的计算和分析发现，在不同的参数范围内其存在四种不同的行为，以此得到了相应的相图，表明在非杂化的 Mott 相和完全杂化的 Kondo 绝缘体相之间存在一个过渡相。这证实了实验中所提出的两阶段杂化图像，第一次通过数值方法来研究重费米子系统中的杂化动力学，并以此解释重费米子系统中的新奇性质。在第二个工作中，我们将周期性 Anderson 模型中的两个特征能标——间接带隙 Δ_{ind}、直接带隙 Δ_{dir} 与 Hubbard 模型中的两个能标 ω^* 与 Ω 联系起来。这表明在强关联多体系统中，两阶段过程可能是一个普适的现象，从局域态开始经历一个部分退局域的预备阶段，最终建立长程的相干态。在最后一个工作中，我们在动力学平均场框架下，使用杂化展开连续时间量子蒙特卡罗方法作为杂质求解器，结合机器学习将 Hubbard 模型与一个具有两体相互作用的经典模型

对应起来。这个经典模型中的二体相互作用具有指数衰减的形式，并可以用一个有效相互作用长度 ξ 来刻画。半满情况下的 Hubbard 模型中的 Mott 相变对应于该经典模型中由 ξ 驱动的气液相变，并且在相变点附近 ξ 具有对数的发散行为。在动力学平均场的框架下可以得到一个金属绝缘的共存区域，这个共存区域可能反映了 Mott 相变的两阶段过程。

关键词：强关联电子系统，重费米子，量子蒙特卡罗，动力学平均场，杂化涨落，Mott 相变

Abstract

In last decades, strongly correlated electronic systems have been one of the most important research directions in condensed matter physics. In the strongly correlated electronic systems, the strong Coulomb interaction between electrons leads to rich exotic physical properties. Strongly correlated electronic systems are usually compounds with partially filled $d-$ or $f-$electronic shells, such as colossal magnetoresistive manganese oxides, heavy fermion compounds, high-temperature superconductors etc.

Due to the strong Coulomb interaction between electrons, the traditional band theory based on single electron approximation fails to describe the properties of strongly correlated systems. Many new theories and numerical methods, such as exact diagonalization (ED), numerical renormalization group (NRG), quantum Monte Carlo (QMC) and dynamical mean-filed theory (DMFT) etc, are invented. Using these methods, people study the models of strongly correlated system numerically and obtain many important results giving us a deeper understand of the inside physical picture. In this thesis, we introduce some important models in strongly correlated system and numerical methods such as determinant quantum Monte Carlo (DQMC) and dynamical mean-filed theory. DQMC deals directly with lattice problems, while the DMFT maps the lattice model to an effective impurity model and then solves it by a self-consistent iteration. In addition, we also introduce the numerical renormalization group and the hybridization expansion continuous time quantum Monte Carlo as the impurity solvers.

The two-stage hybridization process is proposed based on the analysis of anomalous quasiparticle relaxation in the ultrafast optical pump-probe experiment of $CeCoIn_5$. The first work in this thesis is the study of hybridization fluctuations in the half-filled periodic Anderson model by determinant quantum Monte Carlo. Our results show that the hybridization function have four distinct behaviors for different parameters. Thus we obtain a tentative phase diagram based solely on hybridization fluctuation spectra and find a crossover regime between the unhybridized Mott state and fully hybridized Kondo insulating state. This confirms the proposed two-stage hybridization picture in recent

experiments, which is the first time to explain the exotic properties in heavy fermion system by numerically studying its hybridization fluctuations. Then we combine the two energy scales, Δ_{ind} and Δ_{dir}, in the periodic Anderson model with the two energy scales, ω^* and Ω, in the Hubbard model. This indicates a generic two-stage process to build up the lattice coherence of itinerant quasiparticles in the correlated lattice system. Before the long-range coherence is eventually established, there exists a precursor stage where the electrons become partially delocalized with damped quasiparticle excitations. In the last work, we map the half-filled Hubbard model in the framework of dynamical mean-field theory with hybridization expansion continuous time Monte Carlo as the impurity solver to an effective classical model and derive an effective classical correspondence of the Mott transition. This classical model has two-body interaction of exponential form with a characteristic interaction range ξ. The Mott transition corresponds to a liquid-gas transition in the classical model driven by the interaction range ξ which shows a logarithmically divergent behavior around the critical point. In the framework of DMFT, there is a coexisting insulating and metallic regime and this regime may reveal a two-stage process of the Mott transition.

Key Words: Strongly correlated electron system, Heavy fermion system, Quantum Monte Carlo, Dynamical mean-field theory, Hybridization fluctuation, Mott transition

目 录

第 1 章 引言 ····· 1
1.1 强关联电子系统 ····· 1
1.1.1 强关联电子系统简述 ····· 1
1.1.2 强关联电子系统的基本模型 ····· 2
1.2 重费米子系统 ····· 8
1.2.1 重费米子基础 ····· 8
1.2.2 近藤效应 ····· 9
1.2.3 RKKY 相互作用 ····· 10
1.3 $CeCoIn_5$ 中的两阶段杂化图像 ····· 12
1.4 论文结构 ····· 13
第 2 章 强关联系统中的数值计算方法 ····· 15
2.1 行列式量子蒙特卡罗方法 ····· 15
2.1.1 蒙特卡罗方法基础 ····· 15
2.1.2 Trotter 分解和 Hubbard-Stratonovich 变换 ····· 17
2.1.3 行列式权重 ····· 19
2.1.4 单粒子格林函数 ····· 22
2.1.5 蒙卡采样和更新 ····· 24
2.1.6 符号问题 ····· 27
2.2 动力学平均场 ····· 28
2.2.1 无穷维局域近似 ····· 28
2.2.2 动力学平均场基本方程 ····· 29
2.2.3 DMFT 的自洽流程 ····· 33
2.3 杂质求解器 ····· 34
2.3.1 数值重整化群 ····· 36
2.3.2 杂化展开连续时间量子蒙特卡罗 ····· 45
第 3 章 半满周期性安德森模型中的杂化涨落 ····· 55
3.1 研究背景 ····· 55
3.2 模型和方法 ····· 56
3.3 计算结果 ····· 57
3.3.1 不同参数下的杂化关联函数 ····· 57
3.3.2 局域与非局域贡献 ····· 60
3.3.3 相图 ····· 61
3.4 本章小结 ····· 62

第 4 章 Mott 与 Kondo 晶格物理的能标对应 ····· 65
4.1 研究背景 ····· 65
4.2 模型和方法 ····· 67
4.3 计算结果 ····· 67
4.3.1 能标定义 ····· 67
4.3.2 标度行为与物理图像 ····· 69
4.3.3 相图 ····· 72
4.4 本章小结 ····· 73
第 5 章 Mott 相变的经典对应 ····· 75
5.1 研究背景 ····· 75
5.2 模型与方法 ····· 78
5.3 计算结果 ····· 81
5.3.1 经典映射的测试 ····· 81
5.3.2 势函数的拟合以及拟合参数的行为 ····· 82
5.4 本章小结 ····· 85
第 6 章 总结与展望 ····· 87
参考文献 ····· 89
个人简历 ····· 97
发表文章目录 ····· 99
致谢 ····· 101

图形列表

1.1 Kmetko-Smith 图。元素周期表中 d，f 电子局域性变化情况。 …… 2
1.2 Hubbard 模型示意图，t 为最近邻格点间电子的跃迁系数，当两个不同自旋电子占据同一个格点时，产生库仑排斥相互作用 U。 …… 3
1.3 半满 Hubbard 模型在不同库仑排斥 U 下的单电子态密度。 …… 4
1.4 单杂质 Anderson 模型示意图。其中蓝色圆圈表示无相互作用的导带电子，t 为最近邻格点间的跃迁系数；红色圆圈表示考虑库仑相互作用的杂质电子，其与杂质格点处的导带电子的存在杂化作用，其强度为 V。 …… 5
1.5 单杂质 Anderson 模型的平均场相图。(a) $U < \pi\Delta$，在费米面附近存在单个的 f 电子共振峰。(b) $U > \pi\Delta$, f 电子谱函数分裂由 U 分开的两个峰。 …… 6
1.6 周期性 Anderson 模型示意图。其中蓝色圆圈表示无相互作用的导带电子，红色圆圈表示考虑库仑相互作用的杂质电子。与单杂质 Anderson 模型不同的是在每一个格点上都存在一个杂质。 …… 7
1.7 在 $T \to 0$ 时，周期性 Anderson 模型能带结构示意图。其中 $V_{\mathrm{eff}}, \tilde{\epsilon}_f$ 分别为重整化的杂化强度和 f 电子化学势，Δ_g 为上下两支重整化能带之间的带隙。 …… 8
1.8 三种典型金属低温下电阻行为示意图。 …… 9
1.9 (a) 近藤温度之上的巡游电子与局域磁矩。(b) 近藤温度以下形成近藤屏蔽。 …… 10
1.10 RKKY 相互作用示意图。它是局域磁矩之间的由巡游电子传递的一种间接相互作用。 …… 11
1.11 Doniach 相图。在近藤耦合较大时，近藤效应占主导地位，$T_K > T_{\mathrm{RKKY}}$，低温下系统表现为费米液体行为。在近藤弱耦合较弱时，RKKY 相互作用占主导地位，$T_{\mathrm{K}} < T_{\mathrm{RKKY}}$，低温下系统表现出磁有序行为。两个区域之间之间通常为一个连续的量子相变。 …… 11
1.12 ARPES 实验测量得到的 $CeCoIn_5$ 的电子结构随着温度的演化。 …… 12
1.13 拟合得到的衰减率 γ 随着温度变化的情况。 …… 13

2.1 H-S 变换示意图。 …… 20
2.2 $d \to \infty$ 时的自能示意图。高维空间空间涨落可以忽略，只保留的局域相互作用。 …… 28
2.3 晶格模型映射成单杂质模型的示意图，这个杂质与映射后的浴 (Weiss 场) 耦合。 …… 29

2.4 动力学平均场自洽流程图。 ····· 33
2.5 动力学平均场示意图，等效单杂质模型中的杂质电子可以为空态、单占据态和双占据态。 ····· 34
2.6 利用对称性将哈密顿量矩阵划分到不同的子空间得到块对角矩阵。 · 35
2.7 数值重整化群中将单杂质模型映射到一个半无限链上。(a) 能量表象中对数划分能量区间。(b) 每个区间内积分得到星型哈密顿量。(c) 映射到半无限长的链状哈密顿量。 ····· 37
2.8 段表示法下的位形示意图。其中上下两条线表示不同自旋方向的虚时轴，红色圆点对应一个消灭算符，蓝色圆点对应产生算符。黑色实线为表示一个段对应于单占据态，橙色的阴影区域称为交叠区域，对应双占据态。 ····· 50
2.9 段表示法中插入和删除一个段的示意图。 ····· 51

3.1 杂化关联函数 $L_0(\omega)$ 在不同参数 V 和 T 下的行为。插图为虚部在 $\omega = 0$ 附近的放大图。 ····· 57
3.2 (a)、(b) 对比杂化关联函数 $L_0(\omega)$ 在不同区域内的不同行为特征。(c) f 电子的局域谱函数。(d) 当杂化强度 $V = 1.0$，不同温度下布里渊区内在费米能处的费米子谱强度图。(e) 在所选择路径下的色散关系。 59
3.3 (a) 在不同的区域，杂化关联函数实部 $\mathrm{Re}\, L_0(\omega)$ 的局域和非局域项的比较。(b) 在给定路径上，杂化关联谱函数的强度图。 ····· 60
3.4 由杂化关联函数的行为 $L_0(\omega)$ 而确定的相图。背景颜色反映了虚部的低频斜率的大小。虚线和点表示由实部行为所确定的各个区域的边界。右侧为当 $V = 1.0$ 时，虚部低频斜率在不同温度下的非单调变化行为。 ····· 62

4.1 强关联系统的色散关系 $E_{\mathbf{k}}$ 中出现的 kink。 ····· 66
4.2 f 电子态密度、自能实部和斜率、格林函数实部，以及不同能标的展示。 ····· 68
4.3 不同的能标与重整化因子 Z 的关系。 ····· 70
4.4 Hubbard 模型和周期性 Anderson 模型的能谱强度图以及不同的能标。 ····· 71
4.5 局域自旋磁化率的虚部。 ····· 72
4.6 Hubbard 模型与周期性 Anderson 模型在能量—Z 空间的一个暂定相图。 ····· 73

5.1 DMFT 框架下得到的半满 Bethe 晶格 Hubbard 模型顺磁相图。 ····· 75
5.2 Cr 或者 Ti 掺杂的 V_2O_3 在调制温度、压强和掺杂程度下得到的相图。 ····· 76
5.3 (a) $V_{2-x}Cr_xO_3$ 在不同温度下，从不断减少以及增加压强过程中测量的电导率。(b) 在温度-压强空间下的相图。 ····· 76

5.4 不同参数下的自关联时间。(a) 给定温度 $\beta = 100$，自关联时间随着杂化强度 λ 的变化情况。(b) 给定 $\lambda = 1.5$，自关联时间随 β 的变化情况。 ····· 77

5.5 半满 Hubbard 模型相图，U_{c2} 为从金属态开始算得到的临界 U，U_{c1} 为从绝缘态开始算得到的临界 U。临界端点由黑色圆点标记，阴影区域为金属绝缘共存区。插图为 Bethe 晶格和 DMFT 过程的示意图以及典型的金属态和绝缘态态密度形式。 ····· 79

5.6 CT-HYB 位形到经典系统的映射。虚时间 τ_i (τ_i') 上的一个产生（消灭）算符映射成经典模型中的一个带电荷 $q_i = +(-)$ 的粒子，它们的坐标为：$x_i^+ = \tau_i/\beta, x_i^- = \tau_i'/\beta, \tilde{x}_i^+ = \tilde{\tau}_i/\beta$ 以及 $\tilde{x}_i^- = \tilde{\tau}_i'/\beta$。 ····· 80

5.7 CT-HYB 位形的经典模型对应的建立。对于 CT-HYB 位形的经典模型的建立。(a) 测试样本的权重的对数与拟合的权重对数间的比较。(b) 比较杂化部分的权重的对数与经典模型的能量 $-E_{\text{eff}}$。(c) 经典模型中的两体相互作用的 Legendre 展开系数 $V^l_{q_iq_j}$。(d) 经典模型中的两体相互作用 $V_{q_iq_j}(x)$ 随距离 x 的变化情况。相应的参数为 $U = 3, \beta = 30$。 81

5.8 (a) 不同参数下的等效相互作用势函数形式的拟合。(b) 经典模型中的拟合参数 V_0, ξ 在给定 $\beta = 10, 20, 30$ 情况下的变化情况 ····· 82

5.9 (a) 不同参数下的 V_0 的变化情况。(b) 不同 U 下，粒子对个数 $\langle k \rangle$ 随着 β 的变化情况。 ····· 84

5.10 (a) 在 $V_0 - \xi$ 空间中，在 $\beta = 50$ 的情况下，随着 U 变化的参数流。(b) 从不同的方向靠近临界点时，有效作用长度 ξ 的对数拟合情况。 ··· 85

表格列表

2.1 经典系统平均场理论与量子系统动力学平均场理论的对比。 · · · · · · · · 34

第 1 章　引言

具有强的电子电子间关联作用的系统被称为强关联电子系统。对强关联电子系统的研究可以追溯到 1960 年代初，主要是对过渡金属氧化物中的 Mott 金属绝缘转变以及巡游铁磁性问题的研究，而后重费米子化合物和高温超导体的发现更是引起了人们极大的兴趣，使得强关联电子系统成为凝聚态物理中最重要的研究方向之一。本章我们将简单介绍关于强关联电子系统的一些基本概念、模型，重费米子物理基础以及两阶段杂化图像的提出。并在最后将给出本论文的结构。

1.1　强关联电子系统

1.1.1　强关联电子系统简述

在过去的几十年中，过渡金属、稀土、锕系元素以及它们的化合物由于表现出了很多新奇的物理现象而受到广泛关注，如 Mott 金属—绝缘转变[1–3]、巡游铁磁性[4–7]、重费米子[8–15]、巨磁阻效应[16,17]、高温超导[18–22] 等等。研究发现，它们之所以展示出丰富物理性质主要是因为具有部分填充的 $3d$、$4d$、$4f$ 或 $5f$ 电子壳层。由于 d 和 f 电子比较局域，电子间存在较强的库仑相互作用。更极端的情况，高度局域的电子（通常在 f 轨道内）形成了局域磁矩。局域电子间的相互作用、局域电子与巡游电子间的相互作用使得系统的性质变得非常复杂。图1.1的 Kmetko–Smith 图总结了元素周期表中一些元素的 d、f 电子的局域性的变化情况，在左下角的金属中 d 电子具有较高的巡游性，而右上角的元素则大多包含较为局域的 f 电子。

传统能带论能够成功地描述简单金属及其化合物，但是在强关联电子系统中却失效了，比如说按照传统能带论，未填满的过渡金属氧化物应该表现为金属态，而实验却发现它们是绝缘体[1,24]。这是因为基于单电子近似的传统能带论过于简单，不能够描述强关联体系中复杂的电子间相互作用，从而需要更多全新的理论和模型来描述。接下来将介绍几种描述强关联电子系统的简单模型：Hubbard 模型、单杂质 Anderson 模型以及周期性 Anderson 模型，这些模型都能够部分地得到一些强关联电子系统的性质，在近半个世纪以来被广泛研究。

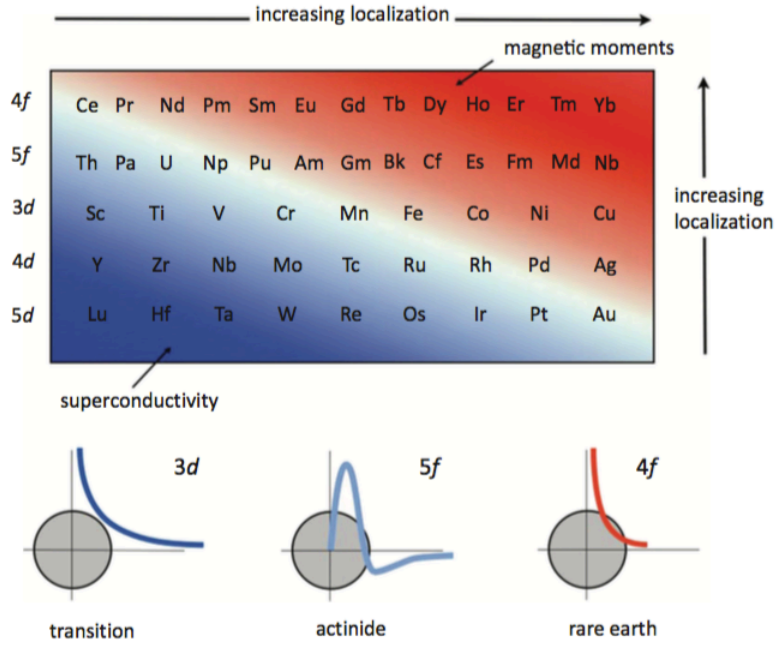

图 1.1 Kmetko-Smith 图。元素周期表中 d，f 电子局域性变化情况[23]。

Figure 1.1 Kmetko-Smith diagram, showing the broad trends towards increasing electron localization of d and f electrons[23].

1.1.2 强关联电子系统的基本模型

在强关联电子系统的研究中，一些简洁的模型忽略了实际材料的复杂的晶格结构和化学特性，抓住其最根本的物理本质，通过一些简单可调的参数来反映系统性质的变化，从这些模型的哈密顿量出发我们可以得到很多有趣的物理图像。下面将介绍几种主要的模型。

- Hubbard 模型

Hubbard 模型[25–27] 是强关联电子系统中研究最广泛的模型，该模型描述了在窄能带中的库仑相互作用。单带 Hubbard 模型哈密顿量如下：

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + h.c.) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}, \tag{1.1}$$

其中 $c^{\dagger}_{i\sigma}(c_{i\sigma})$ 在格点 i 上产生（消灭）一个自旋为 σ 的电子，$n_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i\sigma}$ 为粒子数算符。在 Hubbard 模型中有两个参数，t_{ij} 和 U。其中 t_{ij} 表示电子在不同格点间跃迁的跃迁系数，体现系统的动能。如果只考虑最近邻的跃迁，则有：

$$t_{ij} = \begin{cases} t, & \text{i, j 为最近邻格点,} \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \tag{1.2}$$

U 表示同一个格点上不同自旋的电子间的库仑相互作用强度，体现系统的势能，这里的势能项其实是电子间库仑相互作用的一种简化。在 Wannier 表象下，库仑相互作用势写成如下形式：

$$H_{\mathrm{p}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij\sigma, \\ i'j'\sigma'}} \langle ii'|\frac{1}{\mathbf{r}_{12}}|jj'\rangle c^{\dagger}_{i\sigma} c^{\dagger}_{i'\sigma'} c_{j'\sigma'} c_{j\sigma}, \tag{1.3}$$

$$\langle ii'|\frac{1}{\mathbf{r}_{12}}|jj'\rangle = e^2 \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{\Phi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j)\Phi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{i'})\Phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{j'})}{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}, \tag{1.4}$$

其中，e 表示单位电荷，$\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 为 Wannier 态函数，在窄能带的情况下，其局域在相应的格点坐标 $\mathbf{R}_i$ 附近。正是由于这个原因，上式求和中 $i = i' = j = j'$ 的项是最主要的，势能项可以简化为 $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$，其中

$$U = \langle ii|\frac{1}{\mathbf{r}_{12}}|ii\rangle. \tag{1.5}$$

如图1.2所示为只考虑最近邻跃迁的 Hubbard 模型示意图。

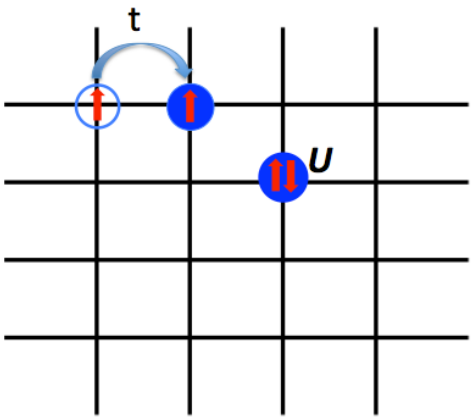

图 1.2 Hubbard 模型介绍示意图。t 为最近邻格点间电子的跃迁系数，当两个不同自旋电子占据同一个格点时，产生库仑排斥相互作用 U。

Figure 1.2 The sketch map of the Hubbard model. t indicates the hopping amplitude of the electron between different sites. There is a Coulomb repulsion energy U when two opposite spin electrons occupy the same cite.

Hubbard 的研究表明[27]，在 Hubbard 模型中，随着库仑排斥 U 的增大，系统的态密度会形成一个上 Hubbard 带和下 Hubbard 带，而当 U 达到一定程度的时候，两个带之间会形成带隙，从而发生金属绝缘转变，如图1.3所示，其中 $\Delta \equiv W$ 为带宽，$I \equiv U$ 为库仑相互作用，$T_0 = -U/2$。

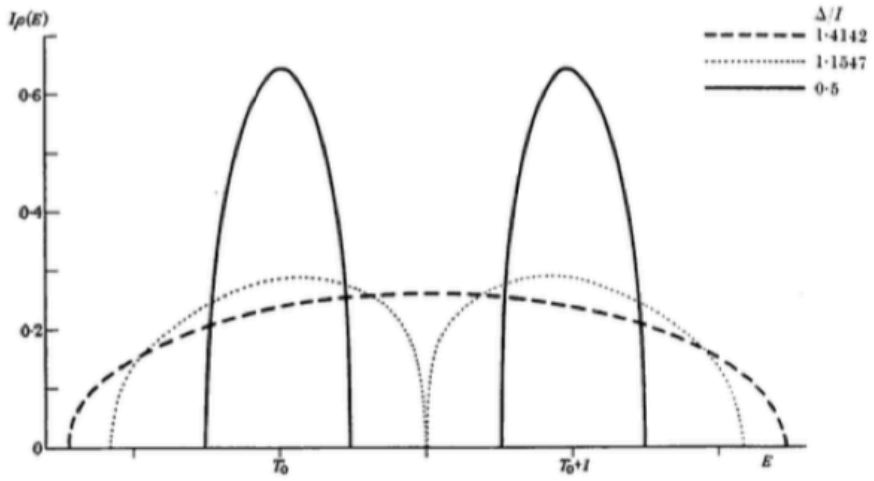

图 1.3 半满 Hubbard 模型在不同库仑排斥 U 下的单电子态密度。$\Delta \equiv W$ 为带宽，$I \equiv U$ 为库仑相互作用，$T_0 = -U/2$。当 $U_c = (2/\sqrt{3})W \simeq 1.1547W$ 时，发生金属绝缘转变[27]。

Figure 1.3 The one-electron density of states in the half-filled Hubbard model for different Coulomb U. $\Delta \equiv W$ is the band width, $I \equiv U$ and $T_0 = -U/2$. The metal-insulator occurs when $U_c = (2/\sqrt{3})W \simeq 1.1547W$ [27].

在 $U \to \infty$ 的极限下，哈密顿量（1.1）约化为一个等效的 $t-J$ 模型[28]：

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij}\tilde{c}^{\dagger}_{i\sigma}\tilde{c}_{j\sigma} + \sum_{ij} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \tag{1.6}$$

其中，$\tilde{c}^{\dagger}_{i\sigma} = c^{\dagger}_{i\sigma}(1-n_{i\bar{\sigma}})$，保证了每个格点上只能占据一个电子。第二项中最近邻交换关联强度 J 满足 $J \sim t^2/U$[29]，自旋算符可以用费米子算符表示出来：

$$\mathbf{S}_i = \sum_{\sigma\sigma'} \tilde{c}^{\dagger}_{i\sigma}\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}\tilde{c}_{i\sigma'}, \tag{1.7}$$

其中 $\mathbf{s}$ 是由 Pauli 矩阵构成的向量：

$$s^x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad s^y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad s^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.8}$$

二维晶格上的 $t-J$ 模型被认为是研究高温超导的一个基本模型[30]。

- 单杂质 Anderson 模型

单杂质 Anderson 模型为一个杂化模型，其中包含了两种类型的电子：无相互作用的巡游电子以及具有相互作用的局域电子，其中局域电子只存在于单个杂质格点上。单杂质 Anderson 模型一般被用来描述量子点或者一些稀磁合金。其哈密顿量写成如下形式：

$$H = -\sum_{ij\sigma} t_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + h.c.) + V\sum_{i\sigma}(c^{\dagger}_{i\sigma}f_{\sigma} + h.c.) + E_f\sum_{\sigma} f^{\dagger}_{\sigma}f_{\sigma} + Un^f_{\uparrow}n^f_{\downarrow}, \tag{1.9}$$

其中 $c^{\dagger}_{i\sigma}(c_{i\sigma})$ 和 $f^{\dagger}_{\sigma}(f_{\sigma})$ 分别为无相互作用的 c 电子和局域 f 电子的产生（消灭）算符，i 为格点坐标，σ 为自旋指标，n^{f}_{σ} 为 f 电子的粒子数算符。哈密顿量的第一项为导带电子间的跃迁项，反映了系统的动能，第二项描述了导带电子与杂质电子之间的杂化，V 为其杂化强度，第三项 E_f 为局域电子的在位能，最后一项为在杂质格点上局域电子间的库仑相互作用，U 为其强度。图1.4为单杂质 Anderson 模型的示意图。

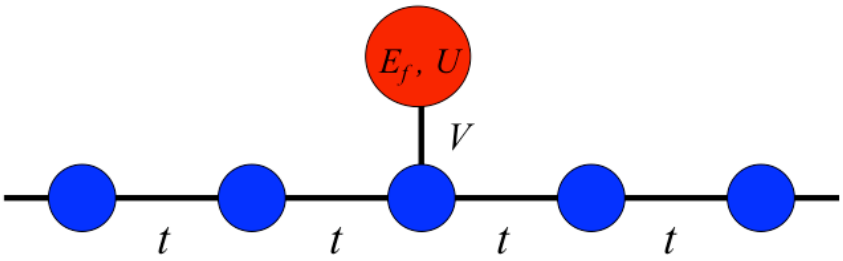

图 1.4 单杂质 Anderson 模型示意图。其中蓝色圆圈表示无相互作用的导带电子，t 为最近邻格点间的跃迁系数；红色圆圈表示考虑库仑相互作用的杂质电子，其与杂质格点处的导带电子间存在强度为 V 的杂化作用，E_f 为其在位能。

Figure 1.4 The sketch map of the single impurity Anderson model. The blue circles indicate the non-interacting conduction electrons and t is hopping amplitude of the electrons between different sites. The red circle indicates the correlated impurity electron which hybridized with conduction electron with the parameter V. E_f is the on-site energy.

1961 年，Anderson 使用平均场近似处理排斥的相互作用项[31]，

$$Un_{\uparrow}n_{\downarrow} \rightarrow Un_{\uparrow}\langle n_{\downarrow}\rangle + U\langle n_{\uparrow}\rangle n_{\downarrow} - U\langle n_{\uparrow}\rangle\langle n_{\downarrow}\rangle + O(\delta n^2), \tag{1.10}$$

其计算表明，在半满情况下，存在一个临界的 U_c，

$$U_c = \pi\Delta, \tag{1.11}$$

其中 Δ 为杂化函数，对于常数的态密度而言，$\Delta = \pi\rho V^2$。当 $U > U_c$ 的时候，系统中会有局域磁矩形成。单杂质 Anderson 模型的平均场相图如1.5所示，当 $U < U_c$，在费米面附近存在单个共振峰，而在 $U > U_c$ 时，f 电子的谱函数会分裂为相隔大约为 U 两个峰。

尽管平均场近似是比较粗糙的，但是这为在实验中观察到的局域磁矩的形成提供了一个定性的理解。而在处理强关联晶格模型的重要方法——动力学平均场理论（DMFT）中，晶格模型被映射到单杂质 Anderson 模型，因此单杂质

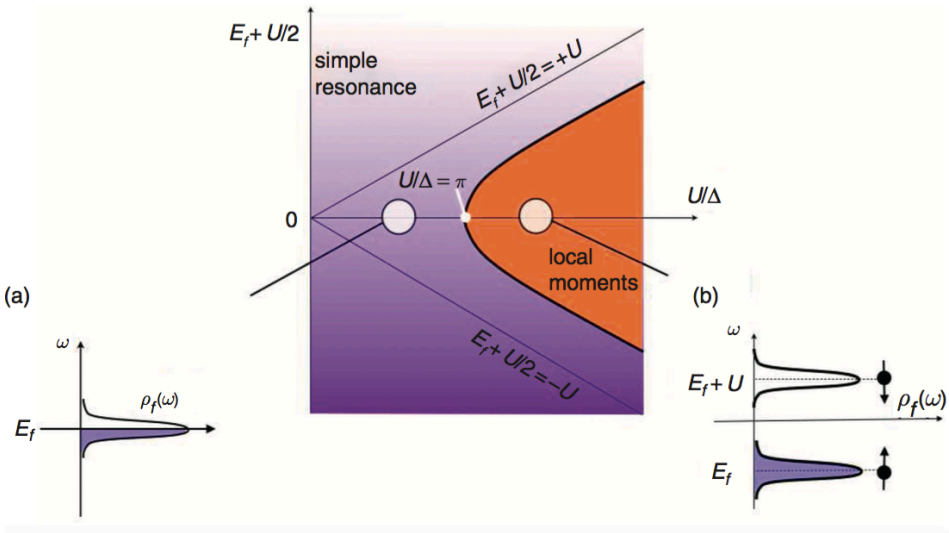

图 1.5 单杂质 Anderson 模型的平均场相图。(a) $U<\pi\Delta$，在费米面附近存在单个的 f 电子共振峰。(b) $U>\pi\Delta$, f 电子谱函数分裂由 U 分开的两个峰[23]。

Figure 1.5 The mean field phase diagram of the single impurity Anderson model. (a) $U<\pi\Delta$, a single resonance peak around the fermi energy. (b) $U>\pi\Delta$, the f electron density of states is split into two peaks by energy U [23].

Anderson 模型的计算和理解是非常重要的。针对单杂质模型发展出来的各种计算方法将在论文的第 2 章中详细介绍。

- 周期性 Anderson 模型

周期性 Anderson 模型也是一种杂化模型，其中包含巡游和局域两种电子。与单杂质 Anderson 模型不同的是，在周期性 Anderson 模型中，在每一个格点都存在一个局域电子轨道，周期性排布的局域电子与巡游电子发生耦合。周期性 Anderson 模型广泛使用于重费米子领域的研究中，其哈密顿量为：

$$\begin{aligned} H = &-\sum_{ij\sigma} t_{ij}\left(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}+h.c.\right)+\sum_{ij\sigma}V_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}f_{j\sigma}+h.c.) \\ &+E_f\sum_{i\sigma}f^{\dagger}_{i\sigma}f_{i\sigma}+U\sum_{i}(n^{f}_{i\uparrow}-\frac{1}{2})\left(n^{f}_{i\downarrow}-\frac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{1.12}$$

其中第一项为巡游导带电子的动能项，第二项为导带电子和局域电子的杂化项，在只考虑局域的杂化的情况下有：

$$V_{ij}=\begin{cases} V, & i=j, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \tag{1.13}$$

第三项为局域电子的在位能，第四项为局域电子间的库仑相互作用项，图1.6为只考虑最近邻跃迁和局域杂化的周期性 Anderson 模型的示意图。

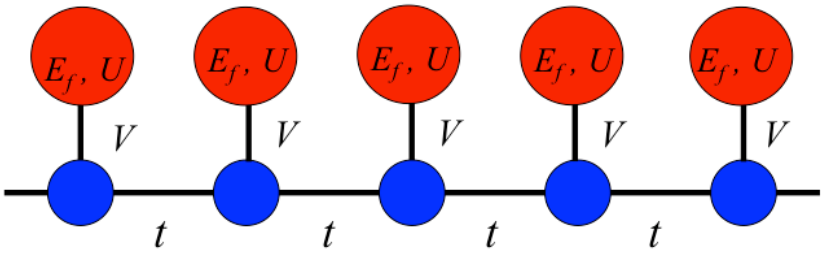

图 1.6 周期性 Anderson 模型示意图。其中蓝色圆圈表示无相互作用的导带电子，红色圆圈表示考虑库仑相互作用的杂质电子。与单杂质 Anderson 模型不同的是在每一个格点上都存在一个杂质。

Figure 1.6 The sketch map of the periodic Anderson model. Similar as the single impurity Anderson model, the blue circles indicate the non-interacting conduction electrons and the red circles indicate the correlated impurity electrons. In the periodic Anderson model, there is an impurity on each site.

平均场处理下，在动量空间周期性 Anderson 模型的哈密顿量写作[23]:

$$H_{\mathrm{MF}}=\sum_{\mathbf{k}\sigma}\left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger},f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\right)\begin{pmatrix}\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} & V_{\mathrm{eff}}\\ V_{\mathrm{eff}}^{*} & \tilde{\epsilon}_f\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_{\mathbf{k}\sigma}\\ f_{\mathbf{k}\sigma}\end{pmatrix}, \tag{1.14}$$

其中 $V_{\mathrm{eff}},\tilde{\epsilon}_f$ 分别为重整化的杂化强度和 f 电子化学势，对角化这个哈密顿量得:

$$H_{\mathrm{MF}}=\sum_{\mathbf{k}\sigma}\left(a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger},b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}\right)\begin{pmatrix}E_{\mathbf{k}}^{+} & 0\\ 0 & E_{\mathbf{k}}^{-}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_{\mathbf{k}\sigma}\\ b_{\mathbf{k}\sigma}\end{pmatrix}, \tag{1.15}$$

其中 $a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger},b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ 表示准粒子的产生算符，它们是 $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ 与 $f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ 的线性组合:

$$\begin{aligned}a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}&=\mu_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}+\nu_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger},\\ b_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}&=-\nu_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}+\mu_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}.\end{aligned} \tag{1.16}$$

求解下面的方程:

$$\begin{aligned}&\det\left[E_{\mathbf{k}}^{\pm}\mathbf{I}-\begin{pmatrix}\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} & V_{\mathrm{eff}}\\ V_{\mathrm{eff}}^{*} & \tilde{\epsilon}_f\end{pmatrix}\right]\\ &=(E_{\mathbf{k}}^{\pm}-\epsilon_{\mathbf{k}})(E_{\mathbf{k}}^{\pm}-\tilde{\epsilon}_f)-V_{\mathrm{eff}}^{2}\\ &=0\end{aligned}, \tag{1.17}$$

得到:

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm}=\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}+\tilde{\epsilon}_f\pm\sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}}-\tilde{\epsilon}_f)^2+4V_{\mathrm{eff}}^{2}}}{2}, \tag{1.18}$$

以及，

上式给出两支杂化能带，如图1.7支能带的带底与下支能带的带顶之间存在宽度为 $\Delta_g \sim V_{\mathrm{eff}}^2/W$ 的带隙，就是所谓的间接带隙，同时还存在另一个直接带隙 $\Delta_{\mathrm{dir}} = 2V_{\mathrm{eff}}$。费米面附近的能带很平，表现在态密度上为一个很尖锐的峰。

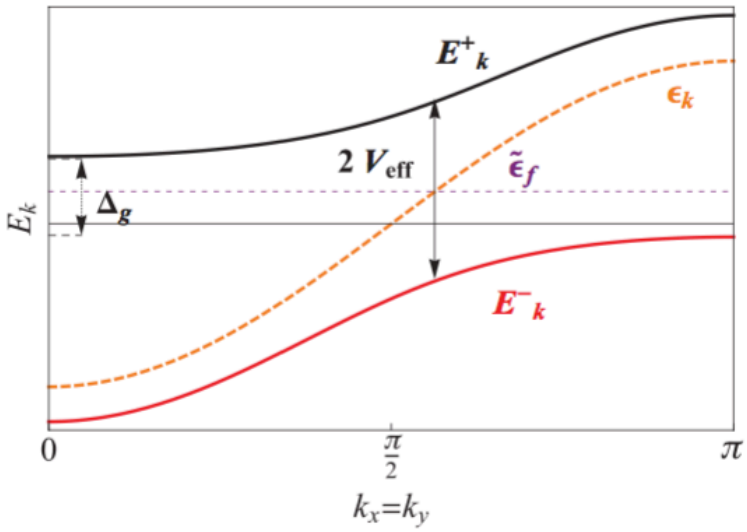

图 1.7 在 $T \to 0$ 时，周期性 Anderson 模型能带结构示意图。其中 $V_{\mathrm{eff}}, \tilde{\epsilon}_f$ 分别为重整化的杂化强度和 f 电子化学势，Δ_g 为上下两支重整化能带之间的带隙[32]。

Figure 1.7 Schematic map of the band structure for a periodic Anderson model at $T \to 0$ limit. V_{eff} and $\tilde{\epsilon}_f$ are the renormalized hybridization and f electron chemical potential, respectively. Δ_g is the hybridization gap between the lower and upper renormalized bands[32].

1.2 重费米子系统

1.2.1 重费米子基础

重费米子系统是一种典型的强关联电子系统。实验上发现的第一个重费米子材料为 $CeAl_3$[8]，在 1975 年 Andres 测量了其在极低温下的比热，发现其线性比热系数达到了 $\gamma = 1620$ mJ/mol K^2，比一般的金属比热系数大两到三个量级。随后在其他的稀土元素和锕系元素的金属化合物中也发现了类似的现象，根据朗道费米液体理论，这种材料中准粒子的有效质量（m^*）比自由电子质量大两到三个数量级，因此而被称为重费米子。

重费米子系统主要为具有较强库仑相互作用的 f 电子系统，后来的研究中也发现少量的 d 电子的重费米子化合物，如 LiV_2O_3[10–14]。在重费米子系统中，局域电子往往表现出局域磁矩的行为，晶格中周期排布的局域磁矩与巡游电子发生杂化耦合，导带电子重整化，使得准粒子具有很高的有效质量。

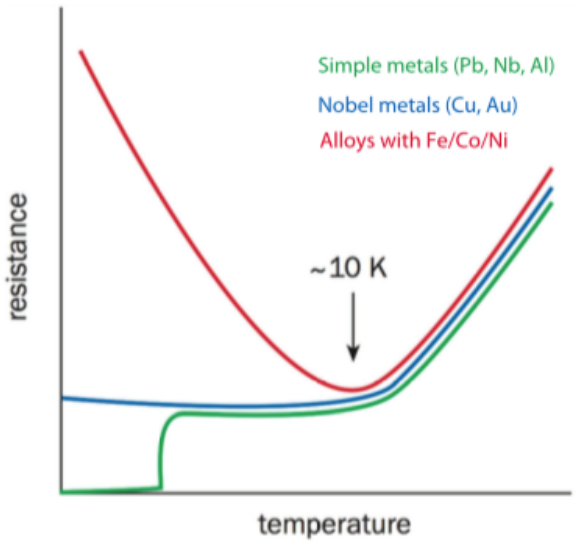

图 1.8 三种典型金属的低温电阻行为示意图[33]。

Figure 1.8 Sketch diagram of the resistance behaviors of three kinds of typical metals[33]。

重费米子材料主要的能量尺度很低，一般只在几个毫电子伏的能量量级，实验上一般通过温度、压强、掺杂、磁场等外界环境的调控来改变其性质，在低温下表现出非常丰富的物理图像，如非常规超导、非费米液体、量子临界点以及隐藏序等等。正是由于其复杂的相图结构，重费米子为研究磁性与超导关系、局域巡游转变、量子临界行为等等提供了很好的平台。

1.2.2　近藤效应

人们在稀磁合金的研究中发现，在其电阻的测量中存在不同于贵金属和简单金属的行为。如图1.8所示，贵金属在低温表现出与温度无关的常数电阻行为，简单金属在表现出超导行为，而对于稀磁合金，其电阻在扣除声子散射的贡献后表现为对数上升的行为，$R_{\mathrm{imp}} = a - b\ln T$。1964 年，日本物理学家近藤（Kondo）从 s-d 交换模型出发[34]，

$$H_{\mathrm{s-d}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\frac{J}{N}\right) \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\sigma\sigma'} S \cdot \sigma_{\sigma\sigma'} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma'}. \tag{1.19}$$

考虑到自旋散射的二阶微扰过程，得到在反铁磁耦合 ($J > 0$) 的情况下，杂质贡献的电阻为：

$$R_{imp} = R_0 \left[1 + 4J\rho_F \ln\left(\frac{k_B T}{D}\right)\right], \tag{1.20}$$

其中包含一个随温度变化的对数项，解释了稀磁合金中的电阻的奇异行为，从而这一现象也被称为“近藤效应”。

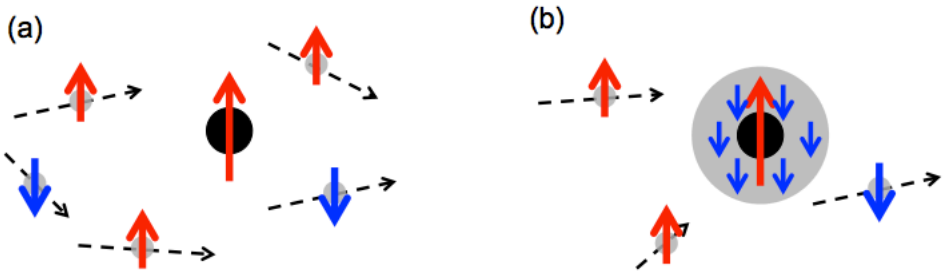

图 1.9 (a) 近藤温度之上的巡游电子与局域磁矩。(b) 近藤温度以下形成近藤屏蔽。
Figure 1.9 (a) The itinerant conduction electrons and the local moment above the Kondo temperature. (b) Kondo screening below the Kondo temperature.

需要注意的是，这个对数项在温度趋近于零时会出现发散行为，这与实验中的观测是不一致的。人们进一步研究得到一个重要的特征温度 T_K，

$$T_K \simeq \rho^{-1} e^{-1/\rho J} \tag{1.21}$$

也就是近藤温度，其中 ρ 为费米面附近的电子态密度。在近藤温度之下，系统进入强耦合状态，微扰论的处理失效，需要新的方法来计算。直到 1975 年 Wilson 用数值重整化群的方法处理单杂质近藤模型，这个问题才基本得到解决[35]。在近藤温度以下，由于导带电子与局域磁矩之间的反铁磁耦合作用，大量导带电子会屏蔽掉局域磁矩从而形成对外不显磁性的近藤单态，如图1.9所示。

1.2.3 RKKY 相互作用

不同于稀磁合金，当增加磁性杂质的浓度，局域磁矩在晶格上周期排布，它们之间由导带电子的传递会形成一种新的间接的自旋相互作用，即为由 Ruderman、Kittel、Kasuya 以及 Yosida 等人所提出的 RKKY 相互作用[36–38]，如图1.10所示。RKKY 相互作用具体写作如下形式：

$$H_{RKKY} = \sum_{n \neq m} S_n \cdot S_m J\left(|R_n - R_m|\right), \tag{1.22}$$

其中，

$$J(R) = \frac{9\pi}{2}\left(\frac{J^2}{E_F}\right)\left\{\frac{\cos 2k_F R}{\left(2k_F R\right)^3} - \frac{\sin 2k_F R}{\left(2k_F R\right)^4}\right\}. \tag{1.23}$$

可以发现，其表现为一个受到距离 R 调控的振荡衰减行为。

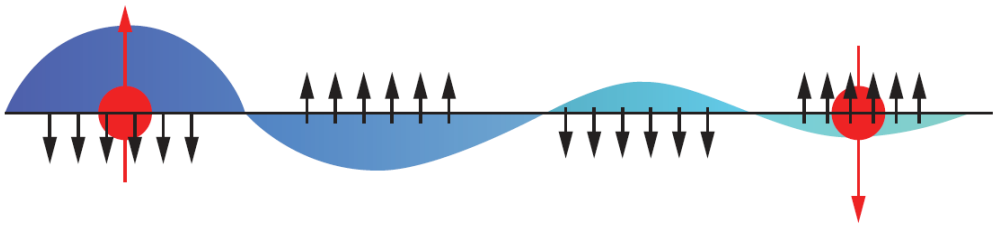

图 1.10 RKKY 相互作用示意图。它是局域磁矩之间的由巡游电子传递的一种间接相互作用[23]。

Figure 1.10 The schematic diagram of the RKKY interaction. It is an indirect interaction due to the the polarized itinerant electrons around a magnetic impurity[23]。

1977 年，Doniach 利用平均场近似研究 Kondo 晶格模型，同时考虑近藤作用和 RKKY 相互作用，得到了著名的 Doniach 相图[39,40]，如图1.11所示。Doniach 指出，在此系统中，近藤相互作用和 RKKY 相互作用有竞争关系，存在不同于近藤温度的另一个能标，即 RKKY 能标，

$$T_{RKKY} \sim J^2\rho, \tag{1.24}$$

两者共同决定了系统的性质。在弱耦合情况下，$J\rho$ 较小，RKKY 相互作用占主

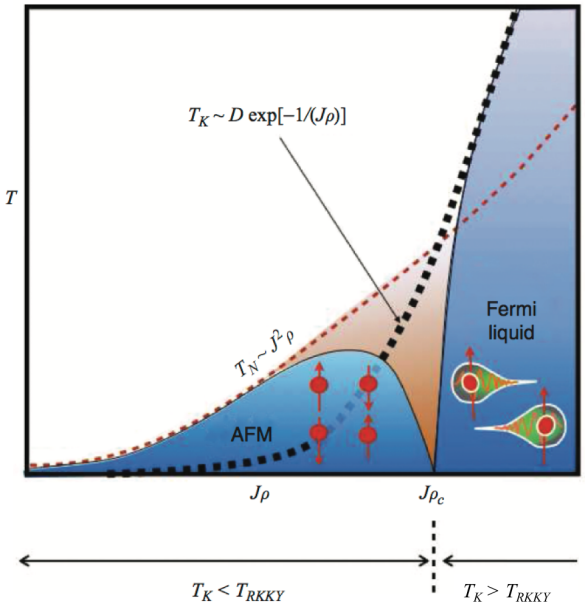

图 1.11 Doniach 相图。在近藤耦合较大时，近藤效应占主导地位，$T_K > T_{\mathrm{RKKY}}$，低温下系统表现为费米液体行为。在近藤弱耦合较弱时，RKKY 相互作用占主导地位，$T_{\mathrm{K}} < T_{\mathrm{RKKY}}$，低温下系统表现出磁有序行为。两个区域之间之间通常为一个连续的量子相变[23]。

Figure 1.11 The Doniach phase diagram. When the Kondo effect dominates, $T_K > T_{\mathrm{RKKY}}$, the system behaves as fermi liquid. When the RKKY interaction dominates, $T_K < T_{\mathrm{RKKY}}$, the system performs magnetic ordering state. Between them there is usually a continuous quantum phase transition[23].

导作用，系统基态表现为反铁磁态；而在强耦合情况下，$J\rho$ 较大，近藤作用占主导，系统基态为费米液体。而当 $T_K \simeq T_{RKKY}$ 的时候，可能存在从反铁磁到费米液体的量子临界点。Doniach 相图给出了重费米子系统的一个在平均场近似下的简单图像。

1.3 $CeCoIn_5$ 中的两阶段杂化图像

在重费米子系统中，局域的 f 电子在所谓的相干温度 T^* 之下可以逐渐转变为巡游重电子。一般认为 T^* 标志着局域 f 电子与导带电子之间的集体杂化的形成，这种杂化导致了低温时的重电子的形成。然而最近 $CeCoIn_5$ 的 ARPES 观测结果表明[41]，在远高于 T^* 之上的温度已经存在了杂化，如图1.12所示，在温度 $T = 120\text{K}$（远高于其相干温度 $T^* \simeq 50\text{K}$）时，费米面附近已经可以看到有明显的能带弯曲。

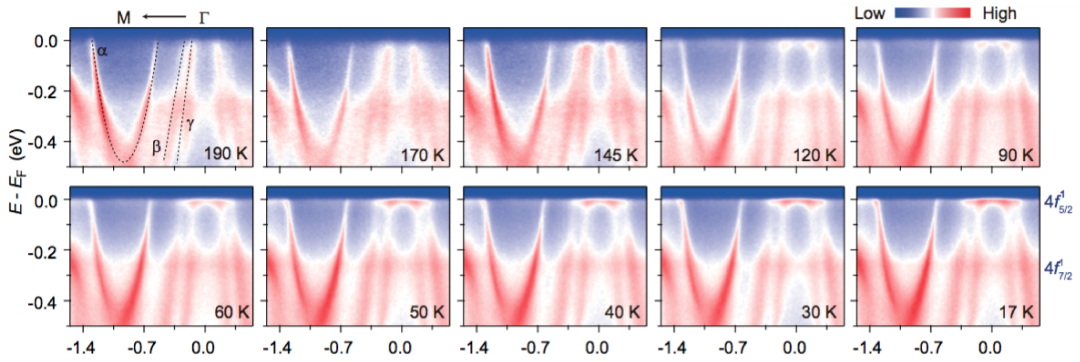

图 1.12 ARPES 实验测量得到的 $CeCoIn_5$ 的电子结构随着温度的演化[41]。在温度 $T = 120\text{K}$（远高于其相干温度，$T^* \simeq 50\text{K}$），费米面附近已经可以看到有明显的色散。

Figure 1.12 Temperature evolution of the electronic structure of $CeCoIn_5$ obtained from ARPES experiment[41]. There is a dispersive feature near E_F clearly discernible around $T = 120\text{K}$ which is quite above its coherence temperature $T^* \simeq 50\text{K}$.

在后来的 $CeCoIn_5$ 超快激光泵浦-探测实验中，通过测量和分析系统的反常准粒子软化提出了两阶段杂化图像[42]。在实验中测量得到的超快时间分辨微分反射率 $\Delta R(t)/R$ 满足指数衰减形式，$\Delta R(t)/R \propto e^{-\gamma t}$。如图1.13所示，在拟合得到的衰减率 γ 随温度的变化情况中可以看到，γ 在 T^* 和 $T^\dagger$ 处有两个明显的反常，而这两个温度一个对应于相干温度 $T^* \simeq 50\text{K}$，另一个与 Chen 的工作[41] 中观察到能带弯曲的温度一致，$T^\dagger \simeq 120\text{K}$。当 $T < T^*$ 时，重电子相干形成，同时在态密度上间接带隙打开，导致了泵浦量依赖的准粒子软化。而在温度高于 120 K，γ 基本上为一个常数。在两者之间，γ 明显减少但是不依赖于泵浦量，表明了在间

接带隙关闭的情况下存在着很强的杂化涨落。两阶段杂化图像认为 $T^{\dagger}$ 表明了杂化涨落的前兆，而 T^{*} 标志着其进一步的形成被间接带隙保护的相干重电子态。

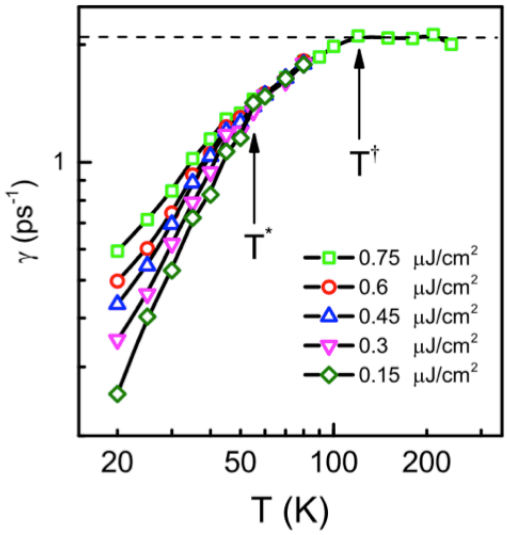

图 1.13 拟合得到的衰减率 γ 随着温度变化的情况[42]。可以看到在 T^{*} 和 $T^{\dagger}$ 处有两个明显的反常。

Figure 1.13 The fitting decay rate γ as a function of temperature[42]. There are two anomalies at T^{*} and $T^{\dagger}$.

1.4　论文结构

本论文引言部分主要介绍了强关联电子系统的背景和基本概念，一些重要的基本模型和重费米子物理的基础，以及两阶段杂化图像的提出。

第二章将介绍常用的强关联电子系统的数值计算方法，包括行列式蒙特卡罗方法（DQMC）、动力学平均场方法（DMFT）以及求解单杂质模型的数值重整化群（NRG）和杂化展开连续时间量子蒙特卡罗方法（CT-HYB）。

第三章将介绍利用 DQMC 方法研究周期性 Anderson 模型中的杂化涨落行为，通过对杂化关联函数的计算给出相应的相图，证实了实验中提出的两阶段的杂化图像。

第四章通过半满周期性 Anderson 模型和 Hubbard 模型中的能标对应，表明强关联晶格系统中两阶段过程是普遍存在的。

第五章将介绍通过动力学平均场方法与机器学习结合给出 Hubbard 模型中的 Mott 相变的经典对应。在动力学平均场的框架下存在一个金属绝缘共存的区域，这可能反映了 Mott 相变中的两阶段过程。

第六章为本论文总结和展望，以及对后续工作的规划。

第 2 章　强关联系统中的数值计算方法

在近几十年对强关联系统的研究中开发出了很多计算方法，如严格对角化（ED）[43]、数值重整化群（NRG）[35,44]、密度矩阵重整化群（DMRG）[45]、量子蒙特卡罗（QMC）[46]、动力学平均场（DMFT）[47] 等等。在本章中，我们将主要介绍行列式量子蒙特卡罗（DQMC）[48,49]、动力学平均场方法（DMFT）以及充当杂质求解器的数值重整化群、连续时间蒙特卡罗（CT-QMC）中的杂化展开算法（CT-HYB）[50–52]。

2.1　行列式量子蒙特卡罗方法

2.1.1　蒙特卡罗方法基础

考虑一个积分问题：

$$I = \int_a^b \mathrm{d}x f(x), \tag{2.1}$$

最简单数值计算方法为，将积分区间 $[a,b]$ 均匀划分为 N 段，每个段的一个端点坐标为 $x_i = a + \frac{i(b-a)}{N}$，那么这个积分可以近似表示为：

$$I \simeq \frac{1}{N}\sum_i f(x_i), \tag{2.2}$$

当 $N \to \infty$ 的时候，这个值将接近真实值。

现在考虑另外一种方法来计算这个积分，将式 (2.1) 转化为：

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b \mathrm{d}x \frac{f(x)}{p(x)} p(x) \\ &= \int_a^b \mathrm{d}x f'(x) p(x). \end{aligned} \tag{2.3}$$

如果，$p(x)$ 满足 $p(x) > 0, \int_a^b p(x)dx = 1$，即在积分区间上恒正归一，那么 $p(x)$ 可以认为是一个概率密度，而 I 则是 $f'(x)$ 在 $p(x)$ 分布下的期望值。那么我们可以抽取满足 $p(x)$ 的样本 $\{X_i\}$, $i = 1, \cdots, M$，样本大小为 M，这样我们就可以用样本均值来估计其期望值，也就是说上面的积分可以表示为：

$$I \simeq \frac{1}{M}\sum_{\{X_i\}} f'(X_i), \tag{2.4}$$

其计算误差为：

$$\Delta = \sqrt{\frac{\mathrm{var}(f')}{M}}, \tag{2.5}$$

其中 $\mathrm{var}(f')$ 为方差，可见，所抽取的样本空间越大，计算误差越小，估计值越接近真实值。

相比于均匀划分区间的计算方法，蒙特卡罗方法很容易推广到高维积分，计算误差与维度无关，也就是说针对于很复杂的相空间的积分，利用蒙特卡罗方法可以进行高效的计算，因此被广泛运用。

在我们面对的问题中，往往需要计算的是一个物理量 O 的期望值：

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int_C \mathrm{d}x O(x) p(x), \tag{2.6}$$

其中 C 表示整个相空间，Z 为配分函数，$Z = \int_C \mathrm{d}x p(x)$，$p(x)$ 为相空间中某个点所对应的权重。

- Markov 链

为了计算物理量期望值 $\langle O \rangle$，最关键的问题是在相空间中抽取满足 $p(x)/Z$ 分布的样本，通常使用构造 Markov 链的方法来完成。首先从一个任意的初始位形 x 出发，按照转移概率 $\mathbf{W}_{xy}$ 从位形 x 转移到位形 y，并不断重复此过程，其形式如下：

$$x \xrightarrow{\mathbf{w}_{xy}} y \xrightarrow{\mathbf{w}_{yz}} z \to \cdots. \tag{2.7}$$

转移概率需要满足要求 $\sum_y \mathbf{W}_{xy} = 1$，表示从位形 x 出发转变到其他所有的位形的概率之和为 1。在构造 Markov 链的过程中，要使得最终产生的样本满足给定分布 $p(x)$，那么需要满足以下遍历性和细致平衡条件：

1. 遍历性：从任意的位形 x 出发，可以经过有限的 Markov 转移过程演化到相空间的任意位形 y。

2. 细致平衡条件：在达到平衡状态时，从 x 态转移到 y 之间的概率与从 y 到 x 之间的概率满足：

$$\frac{\mathbf{W}_{xy}}{\mathbf{W}_{yx}} = \frac{p(y)}{p(x)}. \tag{2.8}$$

- Metropolis-Hastings 算法

Metropolis-Hastings 算法[53,54] 是一种常用的抽取满足给定分布样本的抽样方法。Metropolis-Hastings 算法中，从位形 x 到位形 y 转移概率为：

$$\mathbf{W}_{xy} = \mathbf{W}_{xy}^{\mathrm{prop}} \mathbf{W}_{xy}^{\mathrm{acc}}. \tag{2.9}$$

第一部分为从位形 x 到位形 y 的尝试概率（可能发生的概率）$\mathbf{W}_{xy}^{\text{prop}}$，第二部分是接受概率 $\mathbf{W}_{xy}^{\text{acc}}$。

如果这种变换被接受，那么位形变成 y，否则保持为位形 x。应用细致平衡公式（2.8）得

$$\frac{\mathbf{W}_{xy}^{\text{acc}}}{\mathbf{W}_{yx}^{\text{acc}}} = \frac{p(y)\,\mathbf{W}_{yx}^{\text{prop}}}{p(x)\,\mathbf{W}_{xy}^{\text{prop}}} \equiv R_{xy}, \tag{2.10}$$

且 $R_{yx} = 1/R_{xy}$。于是，可以得到从位形 x 到位形 y 的接受概率为：

$$\mathbf{W}_{xy}^{\text{acc}} = \min\{1, R_{xy}\} = f(R). \tag{2.11}$$

在实际的程序中，我们在 [0, 1] 区间产生一个随机数 r，若 $r < f(R)$ 接受这个变换，并从 y 开始尝试新的变换，如果 $r > f(R)$，则拒绝跃迁，并保持在 x，重新尝试新的位形变换。

蒙特卡罗方法应用到凝聚态物理中，通常是写出模型的配分函数，然后通过对配分函数进行相应的计算处理，将其变换为对相空间抽样的形式。然后再按照 Metropolis-Hastings 抽样的流程完成抽样与物理量的统计计算。

2.1.2　Trotter 分解和 Hubbard-Stratonovich 变换

下面我们将介绍行列式量子蒙特卡罗方法。

行列式量子蒙特卡罗方法（DQMC）是计算费米子晶格模型的一种重要方法，接下来我们以单带 Hubbard 模型，

$$H = -t \sum_{\langle ij\rangle\sigma} \left(c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i} \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \tag{2.12}$$

为例来介绍 DQMC 方法。

考虑一个由两个部分组成的哈密顿量，

$$H = H_1 + H_2, \tag{2.13}$$

根据 Glauber 公式，

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A} e^{\lambda B} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 [A,B]}, \tag{2.14}$$

将虚时 $\beta = 1/T$ 成 m 份，$m\Delta\tau = \beta$，对于每一个虚时段 $\Delta\tau$，可以得到，

$$e^{-\Delta\tau(H_1+H_2)} = e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} + O(\Delta\tau^2), \tag{2.15}$$

上式等号两端同时取 m 次方于是有，

$$e^{-\beta(H_1+H_2)} = \lim_{\Delta\tau\to 0}\left[e^{-\Delta\tau H_1}e^{-\Delta\tau H_2}\right]^m. \tag{2.16}$$

对于单带 Hubbard 模型而言，$H_1 = -t\sum_{\langle ij\rangle\sigma}(c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma} + \text{h.c.})$，为无相互作用的动能部分，可以精确求解，而 $H_2 = U\sum_i (n_{i\uparrow} - 1/2)(n_{i\downarrow} - 1/2)$ 包含四算符项，无法直接计算，需要通过 Hubbard-Stratonovich（H-S）变换将其转化为两算符项。

考虑排斥相互作用 ($U > 0$) 项，

$$\begin{aligned} H_U &= U\left(n_\uparrow - \frac{1}{2}\right)\left(n_\downarrow - \frac{1}{2}\right) \\ &= -\frac{U}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow)^2 + \frac{U}{4}, \end{aligned} \tag{2.17}$$

于是做 H-S 变换将其变成一个高斯积分形式，

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau U(n_\uparrow-\frac{1}{2})(n_\downarrow-\frac{1}{2})} &= e^{-\frac{1}{4}\Delta\tau U}e^{\frac{1}{2}\Delta\tau U(n_\uparrow-n_\downarrow)^2} \\ &= e^{-\frac{1}{4}\Delta\tau U}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int ds e^{-\frac{1}{2}s^2 + s\sqrt{\Delta U}(n_\uparrow-n_\downarrow)}, \end{aligned} \tag{2.18}$$

其中，s 为引入的辅助场。上式为连续场的情况，离散的情况即是引入的辅助场为 Ising 场，则有：

$$e^{-\Delta\tau H_U} = \gamma\sum_{s=\pm} e^{\alpha s(n_\uparrow - n_\downarrow)}, \tag{2.19}$$

对于单个格点而言，只存在四种可能的状态 $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow,\downarrow\rangle$。它们分别表示空占据，自旋向上单电子占据，自旋向下单电子占据和双占据。将等号两端分别作用到四个态上得到，

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle &= 2\gamma|0\rangle, \\ e^{\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle &= 2\gamma\cosh|\uparrow\rangle, \\ e^{\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle &= 2\gamma\cosh|\downarrow\rangle, \\ e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle &= 2\gamma|\uparrow,\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{2.20}$$

解得，

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{2}e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}}, \\ \cosh(\alpha) &= e^{\Delta\tau\frac{U}{2}}. \end{aligned} \tag{2.21}$$

而对于吸引相互作用势，$U<0$，可以得到，

$$H_U=\frac{U}{2}(n_\uparrow+n_\downarrow-1)^2-\frac{U}{4}, \tag{2.22}$$

类似地假设，

$$e^{-\Delta\tau H_U}=\gamma\sum_{s=\pm}e^{\alpha s(n_\uparrow+n_\downarrow-1)}, \tag{2.23}$$

同样作用于四个态，

$$\begin{aligned}
e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle&=2\gamma|0\rangle,\\
e^{\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle&=2\gamma\cosh|\uparrow\rangle,\\
e^{\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle&=2\gamma\cosh|\downarrow\rangle,\\
e^{-\Delta\tau\frac{U}{4}}|0\rangle&=2\gamma|\uparrow,\downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

得到，

$$\begin{aligned}
\gamma&=\frac{1}{2}e^{\Delta\tau\frac{U}{4}},\\
\cosh(\alpha)&=e^{-\Delta\tau\frac{U}{2}}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

综上可得，

$$e^{-\Delta\tau U\sum_i(n_{i\uparrow}-\frac{1}{2})(n_{i\downarrow}-\frac{1}{2})}=\begin{cases}\frac{1}{2}e^{-\frac{1}{4}\Delta\tau U}\sum_{s=\pm}e^{\alpha s(n_\uparrow-n_\downarrow)}, & U>0\\ \frac{1}{2}e^{+\frac{1}{4}\Delta\tau U}\sum_{s=\pm}e^{\alpha s(n_\uparrow+n_\downarrow-1)}, & U<0\end{cases} \tag{2.26}$$

其中 $\cosh(\alpha)=e^{\Delta\tau|U|/2}$，$s$ 即为引入的辅助 Ising 场。从上式中可以看出：在 $U>0$（排斥势）的情况下，辅助场与自旋自由度耦合；$U<0$（吸引势），辅助场与电荷自由度耦合。

这里是在某一个时间片段上的变换，而在每一个时间片段上都会引入相应的 Ising 场，这样就可以将相互作用项的转化为一系列 Ising 场的求和，如图2.1所示。

2.1.3　行列式权重

考虑有限温度的巨正则系统的配分函数，

$$\begin{aligned}
Z&=\mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta\left(H-\mu N_{\mathrm{elec}}\right)}\right]\\
&=\sum_{N_{\mathrm{elec}}}\sum_{\psi_{N_{\mathrm{elec}}}}\langle\psi_{N_{\mathrm{elec}}}|\mathrm{e}^{-\beta\left(H-\mu N_{\mathrm{elec}}\right)}|\psi_{N_{\mathrm{elec}}}\rangle.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

经过 H-S 变换，用 $C=\{s_1,s_2,\ldots,s_m\}$ 表示引入的辅助场位形空间，它是关于虚时的函数，其中 $\beta=\Delta\tau m$，有

$$Z=\sum_C\sum_\psi w_c[\psi], \tag{2.28}$$

其中 $w_c[\psi]=\langle\psi|e^{-\beta H}|\psi\rangle$ 表示对于给定位形情况下的权重，这里 $e^{-\beta H}$ 将被分成许多的时间片处理，然后在每一个时间片利用 H-S 变化来处理相互作用项，从而产生一个等效的无相互作用的哈密顿量。$|\psi\rangle$ 为占据数表象下的基矢，在占据数表象下，任意一个基矢可以写成上下自旋的直积形式，

$$|n_{1\uparrow},n_{2\uparrow},\cdots,n_{N\uparrow}\rangle|n_{1\downarrow},n_{2\downarrow},\cdots,n_{N\downarrow}\rangle, \tag{2.29}$$

其中 $n_{i\sigma}=0,1$，$\sum_{i\sigma}N_{i\sigma}=N_\sigma$，$N_\sigma$ 表示自旋为 σ 的电子数，对于某一个自旋方向有，

$$|n_{1\sigma},n_{2\sigma},\cdots,n_{N\sigma}\rangle=c^\dagger_{i_{N_\sigma}}\cdots c^\dagger_{i_2}c^\dagger_{i_1}|0\rangle, \tag{2.30}$$

我们令，

$$|\psi_{N_\sigma}\rangle=|n_{1\sigma},n_{2\sigma},\cdots,n_{N\sigma}\rangle, \tag{2.31}$$

则有，

$$|\psi_{N_{\text{elec}}}\rangle=|n_{1\uparrow},n_{2\uparrow},\cdots,n_{N\uparrow}\rangle|n_{1\downarrow},n_{2\downarrow},\cdots,n_{N\downarrow}\rangle=|\psi_{N\uparrow}\rangle|\psi_{N\downarrow}\rangle \tag{2.32}$$

其中 $N_{\text{elec}}=\sum_\sigma N_\sigma$。于是，配分函数可以改写为如下形式，

$$Z=\sum_C\sum_{N_\uparrow+N_\downarrow=N_{\text{elec}}}\prod_\sigma\sum_{\psi_{N_\sigma}}w_C^\sigma\left[\psi_{N_\sigma}\right]. \tag{2.33}$$

需要注意的是上式中在不同的自旋的权重计算中共享同一个辅助 Ising 场位形，正是这个共享体现了电子间相互作用。

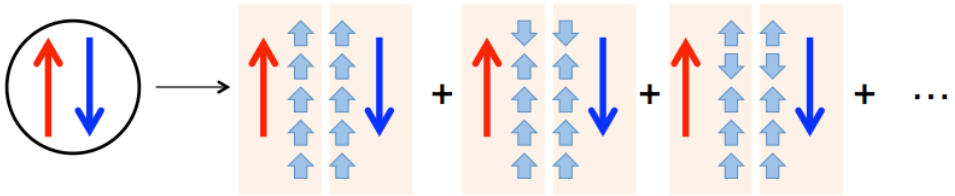

图 2.1 H-S 变换示意图。同一个格点上的电子间相互作用项转化为一系列 Ising 场的求和。
Figure 2.1 An illustration of H-S transformation. The interaction between the electrons on the same site is represented by a series of auxiliary Ising field.

观察上式可以看到，经过 H-S 变换，只留下了两算符项，所以可以进行严格积分掉电子自由度，从而得到配分函数，

$$Z = \sum_{C} \prod_{\sigma} w_{C}^{\sigma}, \tag{2.34}$$

这里的 w_C^σ 为对应于一个位形 C 的权重，往后我们可以看到其为一个行列式形式。

考虑哈密顿量 H，由 Trotter 分解可得，

$$\mathrm{e}^{-\Delta\tau H} = \mathrm{e}^{-\Delta\tau\left(H_1+H_2+\cdots+H_n\right)} = \mathrm{e}^{-\Delta\tau H_1}\mathrm{e}^{-\Delta\tau H_2}\cdots\mathrm{e}^{-\Delta\tau H_n} + \mathcal{O}\left((\Delta\tau)^2\right). \tag{2.35}$$

其中，$\Delta\tau = \beta/m$，相应的配分函数为：

$$Z = \sum_{C}\prod_{\sigma}\sum_{N_\sigma}\sum_{\psi_{N_\sigma}}\langle\psi_{N_\sigma}|\mathrm{e}^{-\Delta\tau c^\dagger M_m c}\cdots\mathrm{e}^{-\Delta\tau c^\dagger M_2 c}\mathrm{e}^{-\Delta\tau c^\dagger M_1 c}|\psi_{N_\sigma}\rangle. \tag{2.36}$$

其中 M_i 表示与虚时段有关的位形依赖的哈密顿量的矩阵，由于经过 H-S 变换后，配分函数中保留了两算符项，所以上式可以直接计算。对于一个具体的位形和给定电子数来说，可以得到：

$$\begin{aligned}
&\sum_{N_\sigma}\sum_{\psi_{N_\sigma}}\langle\psi_{N_\sigma}|\mathrm{e}^{-\Delta\tau c^\dagger M_m c}\cdots\mathrm{e}^{-\Delta\tau c^\dagger M_2 c}\mathrm{e}^{-\Delta\tau c^\dagger M_1 c}|\psi_{N_\sigma}\rangle \\
&= \det(1) + \det\left(B_{11}^\sigma\right) + \det\left(B_{22}^\sigma\right) + \cdots + \det\left(B_{NN}^\sigma\right) \\
&\quad + \det\begin{pmatrix} B_{11}^\sigma & B_{12}^\sigma \\ B_{21}^\sigma & B_{22}^\sigma \end{pmatrix} + \det\begin{pmatrix} B_{11}^\sigma & B_{13}^\sigma \\ B_{31}^\sigma & B_{33}^\sigma \end{pmatrix} + \cdots + \det\begin{pmatrix} B_{N,N-1}^\sigma & B_{N,N}^\sigma \\ B_{N,N-1}^\sigma & B_{NN}^\sigma \end{pmatrix} \\
&\quad + \cdots + \det\begin{pmatrix} B_{11}^\sigma & B_{12}^\sigma & \cdots & B_{1N}^\sigma \\ B_{21}^\sigma & B_{22}^\sigma & \cdots & B_{2N}^\sigma \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{N,1}^\sigma & B_{N2}^\sigma & \cdots & B_{NN}^\sigma \end{pmatrix} \\
&= \det\begin{pmatrix} 1+B_{11}^\sigma & B_{12}^\sigma & \cdots & B_{1N}^\sigma \\ B_{21}^\sigma & 1+B_{22}^\sigma & \cdots & B_{2N}^\sigma \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{N1}^\sigma & B_{N2}^\sigma & \cdots & 1+B_{NN}^\sigma \end{pmatrix} \\
&= \det\left[I + B^\sigma(\beta,0)\right],
\end{aligned} \tag{2.37}$$

其中 N 为格点大小，$B_{ij}^{\sigma}=B_{ij}^{\sigma}(\beta,0)$ 表示单电子传播子，其定义为：

$$B_{ij}(\tau_2,\tau_1)=\left\langle 0\left|c_i\left[\mathcal{T}\exp\left(-\int_{\tau_1}^{\tau_2}H(\tau)\,\mathrm{d}\tau\right)\right]c_j^{\dagger}\right|0\right\rangle. \tag{2.38}$$

它满足如下关系：

$$\begin{aligned} c_i(\tau_2)&=\sum B_{ij}(\tau_2,\tau_1)c_j(\tau_1),\\ c_i^{\dagger}(\tau_2)&=\sum c_j^{\dagger}(\tau_1)B_{ji}^{-1}(\tau_2,\tau_1). \end{aligned} \tag{2.39}$$

相应的多粒子传播子为：

$$\begin{aligned} &\left\langle 0\left|c_{i_1}c_{i_2}\cdots c_{i_{N_\sigma}}\left[\mathcal{T}\exp\left(-\int_{\tau_1}^{\tau_2}H(\tau)\,\mathrm{d}\tau\right)\right]c_{j_{N_\sigma}}^{\dagger}\cdots c_{j_2}^{\dagger}c_{j_1}^{\dagger}\right|0\right\rangle\\ &=\det\begin{pmatrix} B_{i_1j_1}(\tau_2,\tau_1) & B_{i_1j_2}(\tau_2,\tau_1) & \cdots & B_{i_1j_{N_\sigma}}(\tau_2,\tau_1)\\ B_{i_2j_1}(\tau_2,\tau_1) & B_{i_2j_2}(\tau_2,\tau_1) & \cdots & B_{i_2j_{N_\sigma}}(\tau_2,\tau_1)\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ B_{i_{N_\sigma}j_1}(\tau_2,\tau_1) & B_{i_{N_\sigma}j_2}(\tau_2,\tau_1) & \cdots & B_{i_{N_\sigma}j_{N_\sigma}}(\tau_2,\tau_1) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.40}$$

于是，系统的配分函数可以简化为：

$$Z=\sum_C\prod_\sigma w_C^{\sigma}=\sum_C\prod_\sigma\det\left[I+B^{\sigma}(\beta,0)\right]. \tag{2.41}$$

其中，

$$B^{\sigma}(\beta,0)\equiv B^{\sigma}(\beta,\beta-\Delta\tau)\cdots B^{\sigma}(2\Delta\tau,\Delta\tau)\,B^{\sigma}(\Delta\tau,0), \tag{2.42}$$

为系列矩阵的乘积。

2.1.4 单粒子格林函数

由于对于某一个给定的 Ising 位形 C，经过 H-S 变换后，相关物理量的计算都是基于二次型的哈密顿量，所以可以利用 Wick 定理写出每一个位形下的其他物理量，而这些物理量可以用两算符的关联函数表示。定义单粒子格林函数：

$$G_{ij}^{\sigma}(\tau,\tau)\equiv\langle c_{i\sigma}(\tau)\,c_{j\sigma}^{\dagger}(\tau)\rangle=\delta_{ji}-\langle c_{j\sigma}^{\dagger}(\tau)\,c_{i\sigma}(\tau)\rangle. \tag{2.43}$$

考虑在某一个自旋方向上的变换：

$$\begin{aligned} &\mathcal{T}\exp\left(-\int_0^{\beta}H(\tau_0)\,\mathrm{d}\tau_0\right)\\ \to\ &\mathcal{T}\exp\left(-\int_\tau^{\beta}H(\tau_0)\,\mathrm{d}\tau_0\right)\exp\left(hc_{j\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}\right)\mathcal{T}\exp\left(-\int_0^{\tau}H(\tau_0)\,\mathrm{d}\tau_0\right), \end{aligned} \tag{2.44}$$

得到新的权重，

$$w'_C = \det\left[I + B^\sigma(\beta,\tau)\,\mathrm{e}^{hQ}B^\sigma(\tau,0)\right]\left[I + B^{-\sigma}(\beta,\tau)\,B^{-\sigma}(\tau,0)\right], \tag{2.45}$$

其中 Q 矩阵的矩阵元只有 $Q_{ji}=1$，其余都为 0。可以通过对 h 作微分来得到巨正则系综的平均值，

$$\langle c^\dagger_{j\sigma}(\tau)\,c_{i\sigma}(\tau)\rangle = \frac{\partial}{\partial h}\ln w'_C\Big|_{h=0}. \tag{2.46}$$

再利用

$$\ln\det A = \mathbf{Tr}\ln A, \tag{2.47}$$

$$\mathbf{Tr}ABC = \mathbf{Tr}BCA = \mathbf{Tr}CAB, \tag{2.48}$$

以及，

$$\begin{aligned} B(1+AB)^{-1}A &= \left(1+A^{-1}B^{-1}\right)^{-1} \\ &= (BA)(BA)^{-1}\left(1+A^{-1}B^{-1}\right)^{-1} \\ &= (1+BA)(1+BA)^{-1} - (1+BA)^{-1} \\ &= I - (1+BA)^{-1}, \end{aligned} \tag{2.49}$$

得到，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial h}\ln {w^\sigma}'_C\Big|_{h=0} &= \mathbf{Tr}\frac{\partial}{\partial h}\ln\left[I + B^\sigma(\beta,\tau)\,\mathrm{e}^{hQ}B^\sigma(\tau,0)\right]\big|_{h=0} \\ &= \mathbf{Tr}\left[B^\sigma(\beta,\tau)\,QB^\sigma(\tau,0)\left(I + B^\sigma(\beta,\tau)\,B^\sigma(\tau,0)\right)^{-1}\right] \\ &= \mathbf{Tr}\left[B^\sigma(\tau,0)\left(I + B^\sigma(\beta,\tau)\,B^\sigma(\tau,0)\right)^{-1}B^\sigma(\beta,\tau)\,Q\right] \\ &= \left[B^\sigma(\tau,0)\left(I + B^\sigma(\beta,\tau)\,B^\sigma(\tau,0)\right)^{-1}B^\sigma(\beta,\tau)\,Q\right]_{ij} \\ &= \delta_{ij} - \left[\left(I + B^\sigma(\tau,0)\,B^\sigma(\beta,\tau)\right)^{-1}\right]_{ij}. \end{aligned} \tag{2.50}$$

于是，

$$G^\sigma(\tau,\tau) = I - \left[I + B^\sigma(\tau,0)\,B^\sigma(\beta,\tau)\right]^{-1}. \tag{2.51}$$

局域格林函数为 $G^\sigma_{ii}(\tau,\tau) = 1 - \langle n_{i\sigma}(\tau)\rangle$.

2.1.5 蒙卡采样和更新

上节的分析中未考虑哈密顿量的具体形式，这一节中我们将考虑具体的 Hubbard 模型的蒙卡实现。对于 Hubbard 模型：

$$\begin{aligned} H &= H_1 + H_2 + H_3 \\ &= -\sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) - \mu \sum_i n_i, \end{aligned} \tag{2.52}$$

方便起见，这里考虑排斥势的情况，即 $U > 0$。对一个小的时间片段有

$$\mathrm{e}^{-\Delta\tau H} \simeq \mathrm{e}^{-\Delta\tau\left(H_2+H_3\right)}\mathrm{e}^{-\Delta\tau H_1}, \tag{2.53}$$

由于 H_2, H_3 只包含局域项，所以在占据数表象下可以将每一个格点分离，即有，

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{-\Delta\tau\left(H_2+H_3\right)} &= \mathrm{e}^{\Delta\tau\mu\sum_i n_i - \Delta\tau U\sum_i\left(n_{i\uparrow}-\frac{1}{2}\right)\left(n_{i\downarrow}-\frac{1}{2}\right)} \\ &= \prod_i \mathrm{e}^{-\Delta\tau U\left(n_{i\uparrow}-\frac{1}{2}\right)\left(n_{i\downarrow}-\frac{1}{2}\right)} \prod_i \mathrm{e}^{\Delta\tau\mu n_{i\uparrow}} \prod_i \mathrm{e}^{\Delta\tau\mu n_{i\downarrow}} \\ &= \prod_i \left[\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\Delta\tau U} \sum_{s_i=\pm 1} \mathrm{e}^{\alpha s_i\left(n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow}\right)}\right] \prod_i \mathrm{e}^{\Delta\tau\mu n_{i\uparrow}} \prod_i \mathrm{e}^{\Delta\tau\mu n_{i\downarrow}} \\ &= \prod_i \left[\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\Delta\tau U} \sum_{s_i=\pm 1} \prod_\sigma \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_i n_{i\sigma}}\right] \prod_\sigma \prod_i \mathrm{e}^{\Delta\tau\mu n_{i\sigma}}, \end{aligned} \tag{2.54}$$

其中 $\cosh\alpha = \exp\left(\Delta\tau U/2\right)$。对于每一个给定的时间段和给定的辅助 Ising 场位形，上式中的矩阵都是对角的，用以下形式表示，

$$A^{\sigma}(\tau) = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_1(\tau)} & & & 0 \\ & \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_2(\tau)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_N(\tau)} \end{pmatrix}, \tag{2.55}$$

式中忽略了一些积分常数。

下面考虑跃迁项 H_1，计算跃迁矩阵项 $\exp\left(\Delta\tau T\right)$。一种方法是将跃迁矩阵 T 对角化，得到本征值 λ_i 和相应的幺正变换矩阵 V，有

$$\exp\left(\Delta\tau T\right) = V \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\sigma\alpha\lambda_1(\tau)} & & & 0 \\ & \mathrm{e}^{\sigma\alpha\lambda_2(\tau)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathrm{e}^{\sigma\alpha\lambda_N(\tau)} \end{pmatrix} V^T. \tag{2.56}$$

另一种方法考虑：

$$\begin{aligned}\exp\left(\Delta\tau T\right) &= \exp\left(\Delta\tau\sum_{ij}T^{(ij)}\right)\\ &= \prod_{ij}\exp\left(\Delta\tau T_{ij}^{(ij)}\right),\end{aligned} \tag{2.57}$$

其中 $T^{(ij)}$ 是为跃迁项对应的稀疏矩阵，其中只有 $T_{ij}^{(ij)}=T_{ji}^{(ji)}=T_{ij}$ 非零，

$$T^{(ij)}=\begin{pmatrix}0&\cdots&0&\cdots&0&\cdots&0\\ \vdots&\ddots&\vdots&&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&0&\cdots&T_{ij}&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&\ddots&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&T_{ij}&\cdots&0&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&&\vdots&\ddots&\vdots\\ 0&\cdots&0&\cdots&0&\cdots&0\end{pmatrix}, \tag{2.58}$$

因此直接展开有，

$$\exp\left(\Delta\tau T\right)=\prod_{ij}\begin{pmatrix}1&\cdots&0&\cdots&0&\cdots&0\\ \vdots&\ddots&\vdots&&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&\cosh\left(\Delta\tau T_{ij}\right)&\cdots&\sinh\left(\Delta\tau T_{ij}\right)&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&\ddots&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&\sinh\left(\Delta\tau T_{ij}\right)&\cdots&\cosh\left(\Delta\tau T_{ij}\right)&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&&\vdots&\ddots&\vdots\\ 0&\cdots&0&\cdots&0&\cdots&1\end{pmatrix}. \tag{2.59}$$

在 N 格点的模型中，式 (2.42) 最关键的 B^{σ} 可以写作

$$B^{\sigma}\left(\tau',\tau\right)=B^{\sigma}\left(\tau',\tau'-\Delta\tau\right)\cdots B^{\sigma}\left(\tau+2\Delta\tau,\tau+\Delta\tau\right)B^{\sigma}\left(\tau+\Delta\tau,\tau\right), \tag{2.60}$$

结合 N 粒子传播子的定义 (2.40)，可以得到

$$B^{\sigma}\left(\tau,\tau-\Delta\tau\right)=\mathrm{e}^{\Delta\tau\mu}A^{\sigma}\left(\tau\right)\exp\left(\Delta\tau T\right). \tag{2.61}$$

在蒙卡计算中使用 Metropolis 抽样方法，观察上式可以发现，每次采样改变位形时事实上只会影响到 $A^{\sigma}(\tau)$ 矩阵，除了直接使用（2.41）来计算位形权重外，还有更快速的更新方法。

假设在 τ 时刻翻转格点 i 上的辅助场，从 s 变为 s'，相应的 $A^{\sigma}(\tau)$ 矩阵变成 $A'^{\sigma}(\tau)$:

$$\begin{aligned} A'^{\sigma}(\tau) &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_1(\tau)} & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_i'(\tau)} & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \mathrm{e}^{\sigma\alpha s_N(\tau)} \end{pmatrix} \\ &= \left[I + \Delta^{\sigma}(i,\tau)\right] A^{\sigma}(\tau), \end{aligned} \tag{2.62}$$

矩阵 $\Delta^{\sigma}(i,\tau)$ 仅有一个非零矩阵元：

$$\Delta_{ii}^{\sigma}(i,\tau) = \exp\left[\sigma\alpha\left(s_i'(\tau) - s_i(\tau)\right)\right] - 1. \tag{2.63}$$

所以新旧两位位形的权重之比为：

$$R^{\sigma} \equiv \frac{w_{C'}^{\sigma}}{w_C^{\sigma}} = \frac{\det\left[I + B^{\sigma}(\beta,\tau)\left[I + \Delta^{\sigma}(i,\tau)\right] B^{\sigma}(\tau,0)\right]}{\det\left[I + B^{\sigma}(\beta,\tau) B^{\sigma}(\tau,0)\right]}. \tag{2.64}$$

利用以下关系，

$$\det A/\det B = \det B^{-1}A = \det AB^{-1}, \tag{2.65}$$

$$\det(I + AB) = \det(I + BA), \tag{2.66}$$

得到

$$\begin{aligned} R^{\sigma} &= \frac{\det\left[I + B^{\sigma}(\beta,0) + B^{\sigma}(\beta,\tau)\Delta^{\sigma}(i,\tau) B^{\sigma}(\tau,0)\right]}{\det\left[I + B^{\sigma}(\beta,0)\right]} \\ &= \det\left[I + (I + B^{\sigma}(\beta,0))^{-1} B^{\sigma}(\beta,\tau)\Delta^{\sigma}(i,\tau) B^{\sigma}(\tau,0)\right] \\ &= \det\left[I + \Delta^{\sigma}(i,\tau) B^{\sigma}(\tau,0)(I + B^{\sigma}(\beta,0))^{-1} B^{\sigma}(\beta,\tau)\right] \\ &= \det\left[I + \Delta^{\sigma}(i,\tau)(I - G^{\sigma}(\tau,\tau))\right], \end{aligned} \tag{2.67}$$

其中

$$G^{\sigma}(\tau,\tau) = \left[I + B^{\sigma}(\tau,0) B^{\sigma}(\beta,\tau)\right]^{-1}. \tag{2.68}$$

是单粒子等时格林函数。结合矩阵 Δ^{σ} 的性质 (2.63) 可得

$$R = R^{\uparrow}R^{\downarrow} = \prod_{\sigma}\left[1 + \Delta_{ii}^{\sigma}(i,\tau)\left(1 - G_{ii}^{\sigma}(\tau,\tau)\right)\right]. \tag{2.69}$$

以 $\min\{1, R\}$ 的概率接受新的位形，如果接受了 $s_i(\tau)$ 的翻转，那么格林函数的更新公式为:

$$\begin{aligned} G^\sigma(\tau,\tau) &= \left(I + B'^\sigma\right)^{-1} \\ &= \left[I + (I + \Delta^\sigma(\tau)) B^\sigma\right]^{-1} \\ &= \left[(I + B^\sigma) + \Delta^\sigma(\tau) B^\sigma (I + B^\sigma)^{-1} (I + B^\sigma)\right]^{-1} \\ &= (I + B^\sigma)^{-1} \left[I + \Delta^\sigma(\tau) B^\sigma (I + B^\sigma)^{-1}\right]^{-1} \\ &= G^\sigma \left[I + \Delta^\sigma(\tau)(I - G^\sigma)\right]^{-1}, \end{aligned} \tag{2.70}$$

其中 $B^\sigma = B^\sigma(\tau, 0) B^\sigma(\beta, \tau)$。以及含时格林函数，

$$G^\sigma\left(\tau', \tau\right) = B^\sigma\left(\tau', \tau\right) G^\sigma(\tau, \tau) B^\sigma\left(\tau', \tau\right)^{-1}. \tag{2.71}$$

在实际计算中，往往采用 $G^\sigma(\tau,\tau)$ 的快速更新方法。因为矩阵 $\mathbf{\Delta}^\sigma$ 只有一个矩阵元不为零以及结合（2.69），可以得到

$$\begin{aligned} &[I + \Delta(I - G)]\left[I - R^{-1}\Delta(I - G)\right] \\ &= I + \frac{R-1}{R}\Delta(I - G) - \frac{1}{R}\Delta(I - G)\Delta(I - G) \\ &= I + \frac{R-1}{R}\Delta(I - G) - \frac{1}{R}\Delta_{ii}\left(I - G_{ii}\right)\Delta_{ii}(I - G) \\ &= I. \end{aligned} \tag{2.72}$$

于是有，

$$\left[I + \Delta^\sigma(\tau)(I - G^\sigma)\right]^{-1} = I - \frac{1}{R^\sigma}\Delta^\sigma(\tau)(I - G^\sigma), \tag{2.73}$$

两边同时乘上 G^σ ：

$$G^\sigma \to G^\sigma - \frac{1}{R^\sigma} G^\sigma \Delta^\sigma(\tau)(I - G^\sigma), \tag{2.74}$$

写成矩阵元形式:

$$G^\sigma_{jk} \to G^\sigma_{jk} - \frac{1}{R^\sigma} G^\sigma_{ji} \Delta^\sigma_{ii}(\tau)(I - G^\sigma)_{ik}. \tag{2.75}$$

2.1.6　符号问题

当我们用蒙卡模拟来作数值计算的时候，往往需要要求位形的权重 $w(x)$ 为一个非负实数，而 DQMC 中权重为一个行列式，并无法保证其为一个非负实数，当 $w(x)$ 出现负数的情况，则会发生负符号问题，会大大增加计算误差。关于负符号问题问题的来源也一直是人们所研究的问题。在实际的计算中，我们常常

会选择一些特殊的情况来规避负符号问题，比如说在计算 Hubbard 模型的时候，可以证明在保持半满粒子-空穴对称的情况下没有符号问题。而在偏离半满的情况下，需要增加相应的计算量，以及考察符号函数的平均值，

$$\langle \mathrm{sgn} \rangle = \frac{\int_C \mathrm{d}x \mathrm{sgn}\,(\mathrm{x})\,|\mathrm{p}\,(\mathrm{x})\,|}{\int_C \mathrm{d}x |p\,(x)\,|} = \frac{Z}{Z_{|p|}}, \tag{2.76}$$

来判断结果的可靠性。

2.2 动力学平均场

与 DQMC 方法直接处理晶格模型不同，动力学平均场理论（DMFT）将晶格模型映射到一个等效的单杂质模型，通过不断的迭代自洽地求解晶格模型。近些年来 DMFT 在强关联数值计算领域取得了很多成果，是一个非常重要的计算方法。

2.2.1 无穷维局域近似

1989 年，Metzner 与 Vollhardt 提出[55]，在研究高维晶格系统中，在晶格的空间维度 $d \to \infty$（或者配位数 $z \to \infty$）时，自能的空间涨落可以直接忽略，如图2.2所示，在计算中只需要考虑局域的动力学涨落，也就是说 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma(\omega)$，这直接导致了动力学平均场的出现。

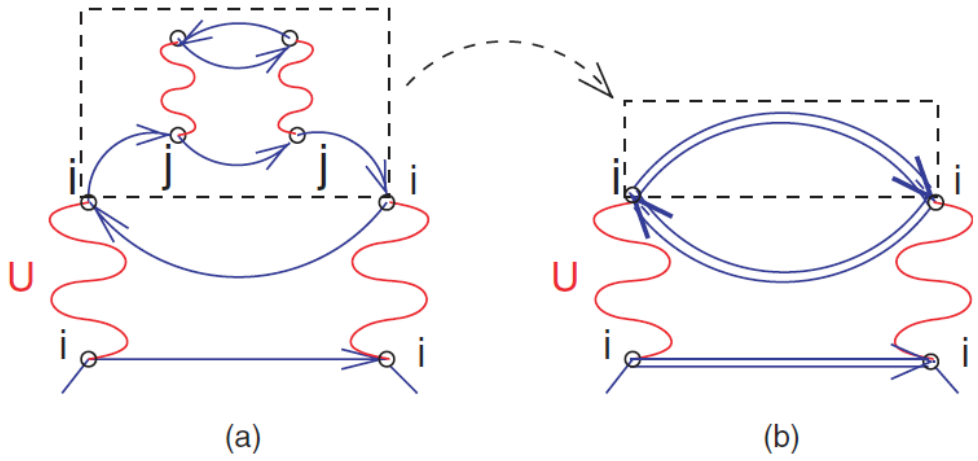

图 2.2 $d \to \infty$ 时的自能示意图。高维空间空间涨落可以忽略，只保留局域的相互作用[56]。
Figure 2.2 An illustration of self-energy in $d \to \infty$. Since the spatial fluctuation can be ignored in high dimension, only the local term persists[56].

2.2.2　动力学平均场基本方程

1992 年，Georges 和 Kotliar 指出在无穷维时候，Hubbard 模型可以被映射成一个单杂质模型[57]，如图2.3所示。杂质格点上的电子可以与无相互作用的有效

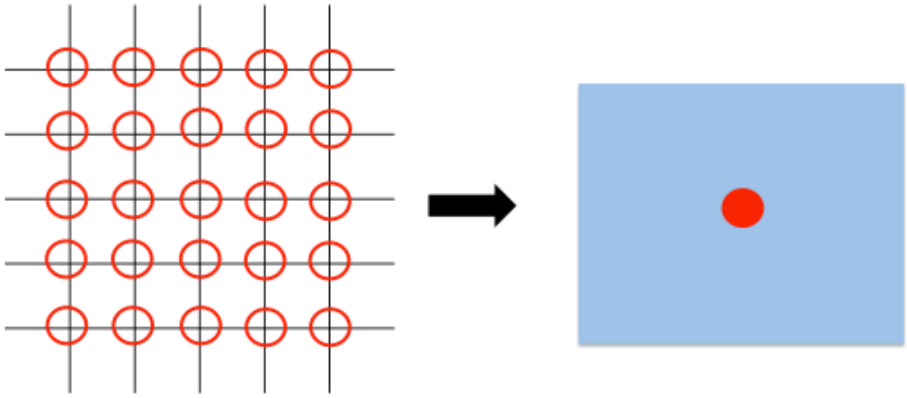

图 2.3 晶格模型映射成单杂质模型的示意图。这个杂质与映射后的浴 (Weiss 场) 耦合。
Figure 2.3 An illustration of mapping the lattice model to single impurity model. The single impurity couples to the bath (Weiss field).

Weiss 场之间发生跃迁，这里的映射实际上还是一个有效的平均场映射。无穷维的时候，在 DMFT 的处理中忽略了空间关联，但是还保留了虚时（时间）关联，即保留了动力学的信息，所以叫做动力学平均场。

- 单杂质模型中的格林函数

对于单杂质 Anderson 模型，其作用量形式可以写作：

$$S_{\mathrm{imp}} = -\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{o\sigma}^\dagger(\tau)\mathcal{G}_0^{-1}(\tau-\tau')c_{o\sigma}(\tau')+U\int_0^\beta d\tau n_{o\uparrow}(\tau)n_{o\downarrow}(\tau), \quad (2.77)$$

其中，$\mathcal{G}_0$ 为映射之后的无相互作用的浴，也就是 Weiss 函数，$c_{o\sigma}^\dagger(c_{o\sigma})$ 表示杂质格点的产生（消灭）算符，n_o 为杂质格点的粒子数算符。对于单杂质模型而言，杂质的自能 $\Sigma_{\mathrm{imp}}(i\omega_n)$、杂质的格林函数 $G_{\mathrm{imp}}(i\omega_n)$ 以及 Weiss 函数可以通过 Dyson 方程联系起来。

考虑单杂质 Anderson 模型哈密顿量，

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij}c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma}(V_i c_{i\sigma}^\dagger d_\sigma + V_i^* d_\sigma^\dagger c_{i\sigma}) + \epsilon_d \sum_\sigma d_\sigma^\dagger d_\sigma + U n_\uparrow^d n_\downarrow^d. \quad (2.78)$$

定义电子格林函数：

$$\begin{aligned} G_{dd}^{\sigma}(\tau-\tau') &= -\langle \mathcal{T}_{\tau} d_{\sigma}(\tau)\, d_{\sigma}^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle, \\ G_{cd}^{\sigma}(\tau-\tau') &= -\langle \mathcal{T}_{\tau} c_{\sigma}(\tau)\, d_{\sigma}^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle, \\ G_{dc}^{\sigma}(\tau-\tau') &= -\langle \mathcal{T}_{\tau} d_{\sigma}(\tau)\, c_{\sigma}^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle, \\ G_{cc}^{\sigma}(\tau-\tau') &= -\langle \mathcal{T}_{\tau} c_{\sigma}(\tau)\, c_{\sigma}^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle. \end{aligned} \tag{2.79}$$

上式中的格林函数都具有同样的结构，

$$G_{12}^{\sigma}(\tau-\tau') = -\langle \mathcal{T}_{\tau} f_1(\tau)\, f_2^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle, \tag{2.80}$$

其中 f_1, f_2 都是杂质格点上的费米子算符。接下来我们要利用运动方程法得到这些格林函数的具体形式。定义 θ-函数，

$$\theta(\tau-\tau') = \begin{cases} 1, & \tau > \tau', \\ 0, & \tau < \tau'. \end{cases} \tag{2.81}$$

于是有，

$$G_{12}(\tau-\tau') = -\theta(\tau-\tau')\langle f_1(\tau)\, f_2^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle \tag{2.82}$$

$$+\theta(\tau'-\tau)\langle f_2^{\dagger}\left(\tau'\right) f_1(\tau)\rangle. \tag{2.83}$$

等式两端同时对虚时 τ 作偏微分，考虑到 $\frac{\partial}{\partial\tau}\theta(\tau-\tau') = \delta(\tau-\tau')$，可得：

$$\frac{\partial}{\partial\tau}G_{12}(\tau-\tau') = -\theta(\tau-\tau')\langle\frac{\partial}{\partial\tau} f_1(\tau)\, f_2^{\dagger}\left(\tau'\right)\rangle \tag{2.84}$$

$$+\theta(\tau'-\tau)\langle f_2^{\dagger}(\tau')\frac{\partial}{\partial\tau} f_1(\tau)\rangle - \delta_{12}\delta(\tau-\tau'), \tag{2.85}$$

化简得，

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}G_{12}(\tau-\tau') + \langle \mathcal{T}_{\tau}\frac{\partial}{\partial\tau} f_1(\tau)\, f_2^{\dagger}(\tau')\rangle = \delta_{12}\delta(\tau-\tau'). \tag{2.86}$$

根据 Heisenberg 方程有，

$$\frac{\partial}{\partial\tau} f(\tau) = [H, f(\tau)]. \tag{2.87}$$

分别代入 $c_{i\sigma}(\tau)$ 和 $d_{\sigma}(\tau)$，有

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\tau} c_{i\sigma}(\tau) &= \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{j\sigma}(\tau) + V_i d_{\sigma}(\tau), \\ \frac{\partial}{\partial\tau} f_{\sigma}(\tau) &= \epsilon_d d_{\sigma}(\tau) + \sum_i V_i c_{i\sigma}(\tau) + U n_{\bar{\sigma}}^{d}(\tau) n_{\sigma}^{d}(\tau). \end{aligned} \tag{2.88}$$

代入到方程 (2.86) 中得到,

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\partial}{\partial\tau}+\mu-\epsilon_d\right)G^{\sigma}_{dd}(\tau-\tau')-\sum_i V_i G^{\sigma}_{cd,i}(\tau-\tau')\\ +U\langle\mathcal{T}_\tau n^d_{\bar{\sigma}}(\tau)d_\sigma(\tau)d^\dagger_\sigma(\tau')\rangle=\delta(\tau-\tau'),\\ -\frac{\partial}{\partial\tau}G^{\sigma}_{cd,i}(\tau-\tau')-\sum_{j,\sigma}t_{ij}G^{\sigma}_{cd,j}(\tau-\tau')-V_iG^{\sigma}_{dd}(\tau-\tau')=0.\end{aligned}\tag{2.89}$$

上式中作了变化 $H\to H-\mu N$，N 为总粒子占据数算符。上式中的库仑项可以写成:

$$U\langle\mathcal{T}_\tau n^d_{\bar{\sigma}}d_\sigma(\tau)d^\dagger_\sigma(\tau')\rangle=\int d\tau_1\Sigma^\sigma(\tau-\tau_1)G^{\sigma}_{dd}(\tau_1-\tau'),\tag{2.90}$$

其中 $\Sigma^\sigma_{\mathrm{imp}}(\tau-\tau_1)$ 即为 d 电子 (杂质电子) 的自能。经过虚时傅里叶变换，式 (2.89) 变换为:

$$\begin{aligned}\left(i\omega_n-\epsilon_d+\mu\right)G^{\sigma}_{dd}(i\omega_n)-\sum_i V_iG^{\sigma}_{cd,i}(i\omega_n)-\Sigma^\sigma_{\mathrm{imp}}(i\omega_n)G^{\sigma}_{dd}(i\omega_n)=1,\\ (i\omega_n+\mu)G^{\sigma}_{cd,i}(i\omega_n)-\sum_{j,\sigma}t_{ij}G^{\sigma}_{cd,j}(i\omega_n)-V_iG^{\sigma}_{dd}(i\omega_n)=0.\end{aligned}\tag{2.91}$$

其中 ω_n 为费米子松原频率，$\omega_n=(2n+1)\pi/\beta$。求解上式，并作实空间的傅里叶变换，可以得到:

$$G^{\sigma}_{dd}(i\omega_n)=\left[i\omega_n-\epsilon_d+\mu-\Delta(i\omega_n)-\Sigma^\sigma_{\mathrm{imp}}(i\omega_n)\right]^{-1},\tag{2.92}$$

其中，$\Delta(i\omega_n)=\sum_{\mathbf{k}}\frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n-\epsilon_{\mathbf{k}}}$ 为杂化函数，而如果我们不考虑电子间的相互作用，可以得到无相互作用的导带电子格林函数，即为:

$$\mathcal{G}_0(i\omega_n)=(i\omega_n-\epsilon_d-\Delta(i\omega_n))^{-1}.\tag{2.93}$$

于是在单杂质 Anderson 模型下，Weiss 场和局域杂质电子格林函数以及自能之间满足如下关系:

$$\Sigma_{\mathrm{imp}}(i\omega_n)=\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)-G^{-1}_{\mathrm{imp}}(i\omega_n).\tag{2.94}$$

- 晶格模型中的格林函数

考虑最简单的 Hubbard 模型:

$$H=-\sum_{ij\sigma}t_{ij}c^\dagger_{i\sigma}c_{j\sigma}+U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}.\tag{2.95}$$

类似于处理单杂质的情况，利用运动方程法，可以得到，

$$G^{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^{\sigma}_{\mathrm{lat}}(\mathbf{k}, i\omega_n)}. \tag{2.96}$$

其中 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 为无相互作用的晶格系统色散关系。前面我们已经提过，在 $d \to \infty$ 的时候，自能的空间涨落可以忽略，也就是说，

$$\Sigma_{\mathrm{lat}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma_{\mathrm{lat}}(i\omega_n). \tag{2.97}$$

所以，将上式代入 (2.96) 中，并对 $\mathbf{k}$ 求和，即可以得到晶格系统的局域格林函数：

$$G^{\sigma}_{\mathrm{lat}}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathrm{lat}}(i\omega_n)}, \tag{2.98}$$

或者改写成态密度积分的形式：

$$G^{\sigma}_{\mathrm{lat}}(i\omega_n) = \int d\epsilon \frac{\rho_0(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma_{\mathrm{lat}}(i\omega_n)}. \tag{2.99}$$

- 自洽方程组

前面提到，DMFT 是将晶格模型映射成一个等效的杂质模型，然后自洽地求解单杂质问题。如果这样的映射是正确的，那么便要求在两个模型中对于一些物理量的测量计算是相等的，于是有，

$$\Sigma_{\mathrm{imp}}(i\omega_n) = \Sigma_{\mathrm{lat}}(i\omega_n). \tag{2.100}$$

在等价的杂质模型中一个重要的信息即是 Weiss 场 $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$，其与杂化函数 $\Delta(i\omega_n)$ 通过式 (2.93) 联系起来，杂化函数由等效的单杂质模型的色散 $\epsilon_{\mathrm{eff}}(\mathbf{k})$ 和 $V(\mathbf{k})$ 决定，在实际的自洽计算中我们并不能得到等效模型的 $\epsilon_{\mathrm{eff}}(\mathbf{k})$ 和 $V(\mathbf{k})$，只能求得杂化函数 $\Delta(i\omega_n)$。

整理相关公式，可以得到 DMFT 的自洽方程组：

$$\begin{cases} S_{\mathrm{imp}} = -\sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} c^{\dagger}_{o\sigma}(\tau)\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau')c_{o\sigma}(\tau') + U\int_0^{\beta} d\tau n_{o\uparrow}(\tau)n_{o\downarrow}(\tau), \\ G_{\sigma}(\tau - \tau') = -\left\langle \mathcal{T}_{\tau} c_{o\sigma}(\tau)c^{\dagger}_{o\sigma}(\tau') \right\rangle_{S_{\mathrm{imp}}}, \\ \Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n), \\ G_{\mathrm{lat}}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)}. \end{cases} \tag{2.101}$$

这里的 $c_{o,\sigma}(c^{\dagger}_{o,\sigma})$ 表示在杂质格点处的费米子消灭（产生）算符，$G(i\omega_n)$ 表示局域格林函数，$\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ 表示 Weiss 场。

2.2.3　DMFT 的自洽流程

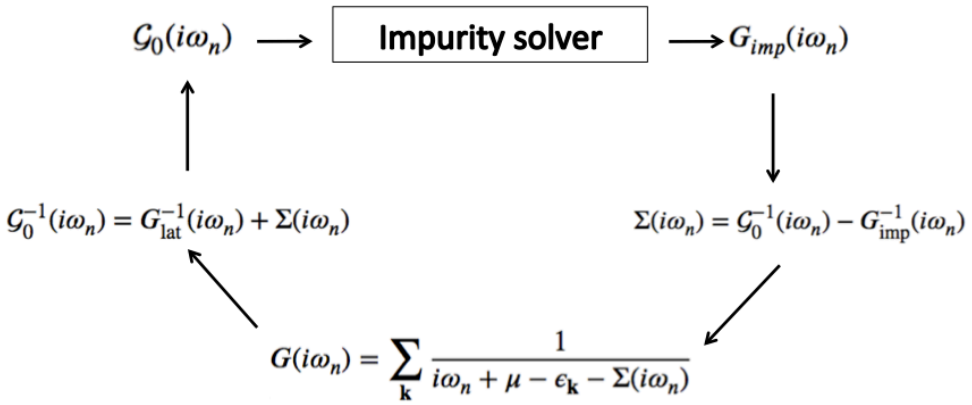

图 2.4 动力学平均场自洽流程图。杂质求解器在其中扮演了最关键的角色。

Figure 2.4 A flow chart of the DMFT self-consistent loop. The impurity solver plays the key role in the loop.

由 DMFT 的自洽方程组 (2.101)，我们可以整理出 DMFT 的一般计算流程，如图2.4所示，

1. 给定初始的 Wiess 场 $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ 作为输入，有的时候也可以使用自能 $\Sigma(i\omega_n)$ 或者杂化函数 $\Delta(i\omega_n)$ 作为输入。

2. 调用杂质求解器对杂质模型进行求解，得到杂质格林函数 $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$。

3. 利用 Dyson 方程得到自能，$\Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n)$。

4. 将自能代入晶格模型的格林函数计算公式，

$$G_{\text{lat}}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)},$$

得到晶格系统的局域格林函数 $G_{\text{lat}}(i\omega_n)$。

5. 再次利用 Dyson 方程，$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) = G_{\text{lat}}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n)$ 计算得到新的 Wiess 函数 $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$，以此构成一个封闭的自洽循环。判断 Wiess 函数是否达到设定的收敛精度，如果未达到，则返回步骤 1 继续计算。

图2.5为 DMFT 的示意图，晶格模型被映射成一个等效的与 Weiss 场耦合的单杂质模型，这个单杂质模型保留了时间上的涨落，Weiss 场不再简单地只是一个静态的数，杂质点上的电子通过与 Weiss 场的耦合可以处于处于空态、单占据态或双占据态，自洽求解地框架下有 $\Sigma_{\text{lat}}(i\omega_n) = \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$，整个系统的动力学的信息保留下来。表2.1简单对比了经典 Ising 模型的平均场求解与量子的 Hubbard 模型的动力学平均场过程。

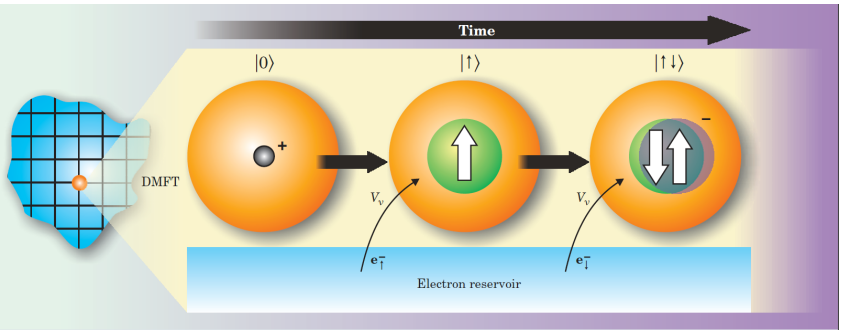

图 2.5 动力学平均场示意图，等效单杂质模型中的杂质电子可以为空态、单占据态和双占据态[58]。

Figure 2.5 The schematic diagram of DMFT. The impurity site can be in the empty state, single occupied state, or double occupied state in the effective single impurity Anderson model[58].

表 2.1 经典系统平均场理论与量子系统动力学平均场理论的对比。

Table 2.1 Comparison between the mean-field theory of a classical system and the dynamical mean-field theory of a quantum system.

量子系统	经典系统	
$H=-\sum_{ij\sigma}t_{ij}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma}+U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$	$H=-\sum_{\langle ij\rangle}JS_iS_j-h\sum_i S_i$	哈密顿量
$G_{ii}(i\omega_n)=-\langle c^{\dagger}_i(i\omega_n)c_i(i\omega_n)\rangle$	$m_i=\langle S_i\rangle$	局域观测量
$H_{\text{eff}}=\sum_{l\sigma}\tilde{\epsilon}_l a^{\dagger}_{l\sigma}a_{l\sigma}-\mu\sum_{\sigma}c^{\dagger}_{\sigma}c_{\sigma}$ $+\sum_{l\sigma}(V_l a^{\dagger}_{l\sigma}c_{\sigma}+h.c.)+Un_{\uparrow}n_{\downarrow}$	$H_{\text{eff}}=-h_{\text{eff}}S_0$	等效哈密顿量
$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)=G^{-1}(i\omega)+\Sigma(i\omega_n)$	h_{eff}	Weiss 场
$G(i\omega_n)=\sum_{\mathbf{k}}\left[i\omega_n+\mu-\epsilon_{\mathbf{k}}-\Sigma(i\omega_n)\right]^{-1}$	$h_{\text{eff}}=\sum_j Jm_j+h$	自洽关系

在整个自洽过程当中，最核心的部分就是杂质求解器，下一节将介绍几种常用的杂质求解器，并着重介绍杂化展开的连续时间量子蒙特卡罗方法。

2.3 杂质求解器

在 DMFT 框架下，所谓的杂质求解器就是求解给定 Weiss 场单杂质模型的方法，如严格对角化、数值重整化群、量子蒙特卡罗等等。

首先我们简单介绍几种常用的方法，然后着重介绍在后面的工作中会用到的杂化展开连续时间量子蒙特卡罗方法。

- 严格对角化

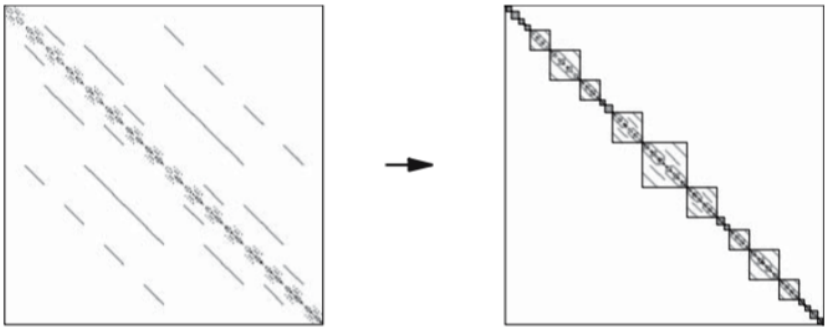

图 2.6 利用对称性将哈密顿量矩阵划分到不同的子空间得到块对角矩阵[61]。

Figure 2.6 With the use of symmetries, the Hamiltonian can be divided into different subspaces and its matrix acquires a block diagonal structure[61].

我们求解一个模型，可以选取某一组正交完备基 $\{\phi\}$，常用的如：

$$|\phi_i\rangle = |1\rangle \otimes |2\rangle \cdots |l-1\rangle \otimes |l\rangle, \tag{2.102}$$

其中，$|l\rangle$ 表示第 l 个格点上的态，对于自旋模型来说，$|l\rangle = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$，对于单带的费米子模型来说，$|l\rangle = \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$。对于更普遍的情况，如果第 l 个格点上有 S_l 个态，那么 $|l\rangle = \{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \cdots, |a_{S_l}\rangle\}$。选定这套基矢之后，可以得到哈密顿量的矩阵，矩阵元为：

$$H_{ij} = \langle\phi_i|H|\phi_j\rangle. \tag{2.103}$$

有了哈密顿量矩阵的具体形式后，对角化这个矩阵就求得了能量本征值 E_i 和本征态 ψ_i。而相应的物理量可以利用这些能量本征值和本征态来计算，比如谱函数的计算可以利用 Lehnmann 表示：

$$A(\omega, T) = \frac{1}{Z}\sum_{nm}(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n})|\langle\psi_n|d^\dagger|\psi_m\rangle|^2\delta(\omega - (E_n - E_m)), \tag{2.104}$$

其中，$\beta = 1/T$，$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ 为配分函数。

可以看到，相空间的大小 M 随着格点数 N 的增加将指数增加，比如对于单带 Hubbard 模型来说 $M = 4^N$。往往可以利用一些对称性，如粒子数守恒，将哈密顿量划分到不同的子空间，如图2.6所示，然后在每一个子空间分别进行对角化。如果只关心系统的基态性质，我们可以使用 Lanczos 方法计算矩阵最小的本征值和本征态[59,60]，这样都可以提高计算的效率。

- Hirsch-Fye 算法

Hirsch-Fye 算法[46] 是量子蒙特卡罗方法的一种，与前面所介绍的 DQMC 方法基本一致，在对配分函数的处理过程中利用 H-S 变换将四算符项变成两算符项并引入辅助的 Ising 场。不同的是，在 DQMC 中直接处理晶格模型，每一个格点都需要引入辅助场，而对于 Hirsch-Fye 算法来说，处理的是单杂质模型，只需要在杂质点作这样的处理。Hirsch-Fye 方法可以认为是行列式蒙特卡罗方法的一种特殊情况，这里就不再赘述。

2.3.1 数值重整化群

数值重整化群[35,44] 是处理单杂质问题的一个非常重要的方法。在数值重整化群中，首先将哈密顿量写到能量表象下，然后通过对能量区间进行对数划分，在每一能量区间积分得到一个离散的哈密顿量，之后再将其映射到一个半无限长的链状哈密顿量上。图2.7为这个过程的示意图，其中绿色圆圈表示杂质电子，$\Delta(\omega)$ 为杂化函数，其决定了最后得到的链状模型中的参数 t_n, ϵ_n。最后迭代对角化处理这个链状哈密顿量，首先处理第一个格点耦合上杂质格点的哈密顿量，对角化得到其本征值以及本征态，然后不断增加导带电子扩大其希尔伯特空间，得到新的哈密顿量以及其本征值本征态，而在这个过程中每一次只保留能量最低的 M_s 个态。在达到所设定的链长后，利用这些本征值和本征态可以求得需要计算的物理量。

- 哈密顿量结构

对于量子杂质模型来说，哈密顿量可以分成 3 个部分，杂质部分 H_{imp}，浴的部分 H_{bath} 和耦合部分 $H_{\text{imp-bath}}$：

$$H = H_{\text{imp}} + H_{\text{bath}} + H_{\text{imp-bath}}, \tag{2.105}$$

以单杂质 Anderson 模型为例，这三个部分写作，

$$\begin{aligned} H_{\text{imp}} &= \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_\sigma^\dagger f_\sigma + U f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\downarrow^\dagger f_\downarrow, \\ H_{\text{bath}} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \\ H_{\text{imp-bath}} &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} (f_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_\sigma). \end{aligned} \tag{2.106}$$

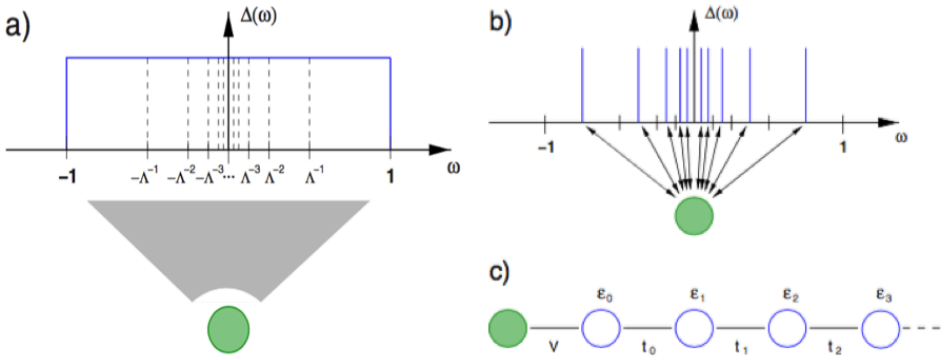

图 2.7 数值重整化群中将单杂质模型映射到一个半无限链上。（a）能量表象中对数划分能量区间。（b）每个区间内积分得到离散哈密顿量。（c）映射到半无限长的链状哈密顿量[44]。

Figure 2.7 (a) The frequency is discretized on a logarithmic grid. (b) A discretized Hamiltonian is obtained by performing integration on each of these intervals. (c) Mapping the discretized model onto a semi-infinite chain[44].

浴对杂质的影响可以用杂化函数来描述，

$$\begin{aligned}\Delta(\omega) = \pi \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \pi \int d\varepsilon V(\mathbf{k}(\varepsilon))^2 \delta(\omega - \varepsilon)\rho(\varepsilon) \\ = \pi V(\omega)^2 \rho(\omega).\end{aligned} \tag{2.107}$$

我们可以将哈密顿量改写成下面的形式，相当于是写到能量表象下，

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{imp}} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^{1} d\varepsilon g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^{1} d\varepsilon h(\varepsilon) \left(f_{\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} + a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right). \tag{2.108}$$

上式中设置了带宽 $D = 1$。

通过两个哈密顿量的作用量相等来说明等价关系。对于哈密顿量 (2.105)，通过路径积分可以求得其作用量为：

$$S[\overline{f}, f] = S_{imp} + (\frac{\beta}{N})^2 \sum_{nm\sigma} \overline{f}_{\sigma n} f_{\sigma m} \sum_{\mathbf{k}} V^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}) A_{nm}^{-1}(\varepsilon_k), \tag{2.109}$$

我们可以把后面的 $\sum_{\mathbf{k}}$ 变成态密度积分的形式，

$$\sum_{\mathbf{k}} V(\varepsilon_{\mathbf{k}})^2 A_{nm}^{-1}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \int_{-1}^{1} d\varepsilon V(\varepsilon)^2 \rho(\varepsilon) A_{nm}^{-1}(\varepsilon), \tag{2.110}$$

其中，

$$A = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\beta}{N}\varepsilon_{\mathbf{k}} & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\beta}{N}\varepsilon_{\mathbf{k}} & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 1 - \frac{\beta}{N}\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \tag{2.111}$$

对于对于哈密顿量 (2.108)，其作用量为：

$$S[\overline{f}, f] = S_{imp} + (\frac{\beta}{N})^2 \sum_{nm\sigma} \overline{f}_{\sigma n} f_{\sigma m} \int_{-1}^{1} d\varepsilon h(\varepsilon)^2 A_{nm}^{-1}(g(\varepsilon)) \tag{2.112}$$

对后面的积分做变换可以得到，

$$\int_{-1}^{1} d\varepsilon h(\varepsilon)^2 A_{nm}^{-1}(g(\varepsilon)) = \int_{-1}^{1} dg \frac{\partial \varepsilon(g)}{\partial g} h(\varepsilon(g))^2 A_{nm}^{-1}(g), \tag{2.113}$$

要让两个作用量相等，即要求 (2.109) 和 (2.112) 相等，也就是 (2.110) 和 (2.113) 相等，那么有

$$\int_{-1}^{1} dg \frac{\partial \varepsilon(g)}{\partial g} h(\varepsilon(g))^2 A_{nm}^{-1}(g) = \int_{-1}^{1} d\varepsilon V(\varepsilon)^2 \rho(\varepsilon) A_{nm}^{-1}(\varepsilon), \tag{2.114}$$

于是得到，

$$\frac{\partial \varepsilon(g)}{\partial g} h(\varepsilon(g))^2 = V(\varepsilon)^2 \rho(\varepsilon) = \Delta(\omega), \tag{2.115}$$

其中，$\varepsilon(\omega)$ 是 $g(\varepsilon)$ 的反函数，也就是说 $g[\varepsilon(\omega)] = \omega$。

- 对数离散化

在能量空间作对数离散化，即取

$$x_n = \pm \Lambda^n, \; n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{2.116}$$

其中 $\Lambda > 1$，为数值重整化群的一个参数。相应的每个能量区间的宽度为，

$$d_n = \Lambda^{-n}(1 - \Lambda^{-1}), \tag{2.117}$$

在每一个能量区间内，定义一个正交完备基，

$$\psi_{np}^{\pm}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i\omega_n p\varepsilon}, & x_{n+1} < \pm\varepsilon < x_n, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases} \tag{2.118}$$

其中，p 为 $-\infty$ 到 ∞ 的整数，$\omega_n = 2\pi/d_n$。下一步，将导带电子的算符 $a_{\varepsilon\sigma}$ 在这套基下展开，也就是说，

$$a_{\varepsilon\sigma} = \sum_{np} \left[a_{np\sigma} \psi_{np}^{+}(\varepsilon) + b_{np\sigma} \psi_{np}^{-}(\varepsilon) \right], \tag{2.119}$$

对应于各个区间上的傅里叶变换。相应的逆变换为，

$$\begin{aligned} a_{np\sigma} &= \int_{-1}^{1} d\varepsilon [\psi_{np}^{+}(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma}, \\ b_{np\sigma} &= \int_{-1}^{1} d\varepsilon [\psi_{np}^{-}(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma}. \end{aligned} \tag{2.120}$$

首先我们来处理杂化项的第一部分，其共轭部分可以同样的处理，

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} d\varepsilon h(\varepsilon) f_\sigma^\dagger a_{\varepsilon\sigma} = f_\sigma^\dagger \sum_{np} \Big[a_{np\sigma} \int^{+,n} d\varepsilon h(\varepsilon) \psi_{np}^{+}(\varepsilon) \\ + b_{np\sigma} \int^{-,n} d\varepsilon h(\varepsilon) \psi_{np}^{-}(\varepsilon) \Big],\end{aligned} \tag{2.121}$$

其中，

$$\int^{+,n} d\varepsilon \equiv \int_{x_{n+1}}^{x_n} d\varepsilon \,, \quad \int^{-,n} d\varepsilon \equiv \int_{-x_n}^{-x_{n+1}} d\varepsilon. \tag{2.122}$$

对于 $h(\varepsilon) = h$，在一个小区间内有

$$\int^{\pm,n} d\varepsilon h \psi_{np}^{\pm}(\varepsilon) = \sqrt{d_n} h \delta_{p,0}. \tag{2.123}$$

也就是说，也就是说杂质与导带中 $p = 0$ 的态耦合。

$h(\varepsilon)$ 使用如下的阶梯函数的形式，在每一个区间内为一个常数[44]，

$$h(\varepsilon) = h_n^{(\pm)}, \quad x_{n+1} < \pm\varepsilon < x_n, \tag{2.124}$$

其中 $h_n^{(\pm)}$ 有杂化函数在相应的区间内的平均值来确定，

$$h_n^{\pm^2} = \frac{1}{d_n} \int^{\pm,n} = d\varepsilon \frac{1}{\pi} \Delta(\varepsilon), \tag{2.125}$$

这样，杂化项改写成下面的形式，

$$\int_{-1}^{1} d\varepsilon \, h(\varepsilon) f_\sigma^\dagger a_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} f_\sigma^\dagger \sum_n \left[\gamma_n^{+} a_{n0\sigma} + \gamma_n^{-} b_{n0\sigma} \right], \tag{2.126}$$

其中 $\gamma_n^{\pm^2} = \int^{\pm,n} d\varepsilon \, \Delta(\varepsilon)$。

接下来处理导带项，其结果为：

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} d\varepsilon \, g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^\dagger a_{\varepsilon\sigma} = \sum_{np} \left(\xi_n^{+} a_{np\sigma}^\dagger a_{np\sigma} + \xi_n^{-} b_{np\sigma}^\dagger b_{np\sigma} \right) \\ + \sum_{n, p \neq p'} \left(\alpha_n^{+}(p,p') a_{np\sigma}^\dagger a_{np'\sigma} - \alpha_n^{-}(p,p') b_{np\sigma}^\dagger b_{np'\sigma} \right).\end{aligned} \tag{2.127}$$

这里的处理分成了两个部分 $p = p'$ 以及 $p \neq p'$。式 (2.127) 中的第一项是对角的，而分离的能量 $\xi_n^{\pm}$ 可以写成，

$$\xi_n^{\pm} = \frac{\int^{\pm,n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \varepsilon}{\int^{\pm,n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon)} = \left[\frac{1}{2} \Lambda^{-n} (1 + \Lambda^{-1}) \right], \tag{2.128}$$

其中方括号里给出的是对于 $\Delta(\varepsilon)$ 为常数的情况的结果。

而对于 $g(\varepsilon)=\varepsilon$ 的情况，有

$$\alpha_n^{\pm}(p,p')=\frac{1-\Lambda^{-1}}{2\pi i}\frac{\Lambda^{-n}}{p'-p}\exp\left[\frac{2\pi i(p'-p)}{1-\Lambda^{-1}}\right]. \tag{2.129}$$

在实际的处理中，直接舍去了 $p\neq 0$ 的项，这是一个近似。我们可以看到 (2.129) 中，有一个 $1-\Lambda^{-1}$ 的因子，在 $\Lambda\to 1$ 的情况下这个因子趋近于 0。

当舍掉 $p\neq 0$ 的项后，重新标记算符令 $a_{n0\sigma}\equiv a_{n\sigma}, etc.$，得到，

$$\begin{aligned} H=&H_{imp}+\sum_{n\sigma}\left[\xi_n^{+}a_{n\sigma}^{\dagger}a_{n\sigma}+\xi_n^{-}b_{n\sigma}^{\dagger}b_{n\sigma}\right]\\ &+\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{\sigma}f_{\sigma}^{\dagger}\sum_{n}(\gamma_n^{+}a_{n\sigma}+\gamma_n^{-}b_{n\sigma})\\ &+\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{\sigma}\left[\sum_{n}(\gamma_n^{+}a_{n\sigma}+\gamma_n^{-}b_{n\sigma})f_{\sigma}\right]. \end{aligned} \tag{2.130}$$

- 映射到半无限场链

我们最终的目的是映射到一个链状的哈密顿量，

$$\begin{aligned} H=&H_{imp}+\sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}}\sum_{\sigma}\left[f_{\sigma}^{\dagger}c_{0\sigma}+c_{0\sigma}^{\dagger}f_{\sigma}\right]\\ &+\sum_{\sigma n=0}^{\infty}\left[\varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger}c_{n\sigma}+t_n\left(c_{n\sigma}^{\dagger}c_{n+1\sigma}+c_{n+1\sigma}^{\dagger}c_{n\sigma}\right)\right], \end{aligned} \tag{2.131}$$

其中的第一个格点为杂质，在这个哈密顿量中只有与第一个格点的导带电子有直接的耦合作用。

那么，我们可以直接从 (2.130) 读出第一项导带电子的形式，注意 (2.130) 中只有第二行和第三行是杂质直接跟导带电子耦合的，

$$c_{0\sigma}=\frac{1}{\sqrt{\xi_0}}\sum_{n}\left[\gamma_n^{+}a_{n\sigma}+\gamma_n^{-}b_{n\sigma}\right], \tag{2.132}$$

其中的归一化因子为:

$$\xi_0=\sum_{n}((\xi_n^{+})^2+(\xi_n^{-})^2)=\int_{-1}^{1}d\varepsilon\Delta(\varepsilon), \tag{2.133}$$

则杂化项写作,

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}f_{\sigma}^{\dagger}\sum_{n}(\gamma_n^{+}a_{n\sigma}+\gamma_n^{-}b_{n\sigma})=\sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}}f_{\sigma}^{\dagger}c_{0\sigma}, \tag{2.134}$$

算符 $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$ 表示半无穷链导带电子的第一个格点，它并不与 $a_{n\sigma}^{(\dagger)},b_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 正交。我们可以通过标准的 Gram-Schmidt 过程用 $c_{0\sigma}^{(\dagger)},a_{n\sigma}^{(\dagger)},b_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 来构造新的相互正交的算符 $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$，同时构造出了链状哈密顿量。

其构造方式如下，

$$\begin{aligned} a_{n\sigma} = \sum_{m=1}^{\infty} u_{mn} c_{m\sigma}\ ,\ b_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} v_{mn} c_{m\sigma}, \\ c_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} \left[u_{nm} a_{m\sigma} + v_{nm} b_{m\sigma} \right] \end{aligned} \tag{2.135}$$

直接从 (2.132) 我们可以得到，

$$u_{0m} = \frac{\gamma_m^+}{\sqrt{\xi_0}}\ ,\ v_{0m} = \frac{\gamma_m^-}{\sqrt{\xi_0}}. \tag{2.136}$$

可以通过导带电子项等价

$$\sum_{n\sigma} \left[\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma} \right] = \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \left[\varepsilon_{n\sigma} c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + t_n (c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}) \right], \tag{2.137}$$

将 (2.135) 中的 $a_{n\sigma} = \sum_{m=1}^{\infty} u_{mn} c_{m\sigma}$ ，$b_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} v_{mn} c_{m\sigma}$ 代入上式，得：

$$\begin{aligned} &\sum_{nm\sigma} \left[\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger u_{mn} c_{m\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger v_{mn} c_{m\sigma} \right] \\ &= \sum_{nm\sigma} \left[\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger u_{mn} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger v_{mn} \right] c_{m\sigma} \\ &= \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \left[\varepsilon_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + t_n \left(c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \right) \right] \end{aligned} \tag{2.138}$$

对比 $c_{m\sigma}$ 的系数，

$$m = 0\ :\ \sum_{n\sigma} [\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger u_{0n} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger v_{0n}] = \varepsilon_0 c_{0\sigma}^\dagger + t_0 c_{1\sigma}^\dagger \tag{2.139a}$$

$$m > 1\ :\ \sum_{n\sigma} [\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger u_{mn} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger v_{mn}] = \varepsilon_n c_{m\sigma}^\dagger + t_m c_{m+1,\sigma}^\dagger + t_{m-1} c_{m-1,\sigma}^\dagger \tag{2.139b}$$

利用，

$$\begin{aligned} c_{0\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n [\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}], \\ c_{0\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n [\gamma_n^+ a_{n\sigma}^\dagger + \gamma_n^- b_{n\sigma}^\dagger], \\ c_{1\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_m [u_{1m} a_{m\sigma} + v_{1m} b_{m\sigma}], \\ c_{1\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_m [u_{1m}^* a_{m\sigma}^\dagger + v_{1m}^* b_{n\sigma}^\dagger], \end{aligned} \tag{2.140}$$

以及 $a_{n\sigma}^{(\dagger)}, b_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 满足费米的反对易关系。取 (2.139a) 与 $c_{0\sigma}$ 的反对易式，并结合式 (2.136)、(2.128) 以及 $\gamma_n^{\pm^2} = \int^{\pm,n} d\varepsilon\, \Delta(\varepsilon)$ 得：

$$\begin{aligned}
&\text{右边} = \varepsilon_0,\\
&\text{左边} = \Big[\sum_n (\xi_0^+ a_{n\sigma}^\dagger u_{0n} + \xi_n^- b_{m\sigma}^\dagger v_{0m}), c_{0\sigma}\Big]_+\\
&\quad = \Big[\sum_n (\xi_0^+ a_{n\sigma}^\dagger u_{0n} + \xi_n^- b_{m\sigma}^\dagger v_{0m}), \frac{1}{\sqrt{\xi_0}}\sum_m (\gamma_m^+ a_{m\sigma} + \gamma_m^- b_{m\sigma})\Big]_+\\
&\quad = \frac{1}{\sqrt{\xi_0}}\sum_n (\xi_n^+\gamma_m^+ u_{0n} + \xi_n^-\gamma_m^- v_{0n})\\
&\quad = \sum_n \frac{1}{\xi_0}(\xi_n^+\gamma_n^{+^2} + \xi_n^-\gamma_n^{-^2})\\
&\quad = \frac{1}{\xi_0}\int_{-1}^{1} d\varepsilon\Delta(\varepsilon)\varepsilon.
\end{aligned} \tag{2.141}$$

于是 $\varepsilon_0 = \dfrac{1}{\xi_0}\displaystyle\int_{-1}^{1} d\varepsilon\Delta(\varepsilon)\varepsilon$ 。

由式 (2.139a) 可得，

$$t_0 c_{1\sigma}^\dagger = \sum_n [(\xi_n^+ - \varepsilon_0)u_{0n}a_{n\sigma}^\dagger + (\xi_n^- - \varepsilon_0)v_{0n}b_{n\sigma}^\dagger], \tag{2.142}$$

于是得，

$$u_{1n} = \frac{1}{t_0}(\xi_n - \varepsilon_0)u_{0n}\,, \qquad v_{1n} = \frac{1}{t_0}(\xi_n^- - \varepsilon_0)v_{0n}, \tag{2.143}$$

取式 (2.142) 与 $c_{1\sigma}$ 的反对易式，

$$\begin{aligned}
&\text{左边} = t_0,\\
&\text{右边} = \sum_n \left[(\xi_n^+ - \varepsilon_0)u_{0n}a_{n\sigma}^\dagger + (\xi_n^- - \varepsilon_0)v_{0n}b_{n\sigma}^\dagger\,,\, c_{1\sigma}\right]_+\\
&\quad = \sum_n \left[(\xi_n^+ - \varepsilon_0)u_{0n}a_{n\sigma}^\dagger + (\xi_n^- - \varepsilon_0)v_{0n}b_{n\sigma}^\dagger\,,\, \sum_m (u_{1m}a_{m\sigma} + v_{1m}b_{m\sigma})\right]_+\\
&\quad = \sum_n \left((\xi_n^+ - \varepsilon_0)u_{0m}u_{1m} + (\xi_n^- - \varepsilon_0)v_{0n}v_{1m}\right)\\
&\quad = \sum_n \left((\xi_n^+ - \varepsilon_0)^2\frac{1}{t_0}\frac{\gamma_n^{+^2}}{\xi_0} + (\xi_n^- - \varepsilon_0)^2\frac{1}{t_0}\frac{\gamma_n^{-^2}}{\xi_0}\right),
\end{aligned} \tag{2.144}$$

于是有，

$$t_0^2 = \sum_n \frac{1}{\xi_0}\left[(\xi_n^+ - \varepsilon_0)^2\gamma_n^{+^2} + (\xi_n^- - \varepsilon_0)^2\gamma_n^{-^2}\right], \tag{2.145}$$

现在考虑 $m>1$，取式 (2.139b) 与 $c_{m\sigma}$ 的反对易式可得，

$$\varepsilon_m=\sum_n(\xi_n^+u_{mn}^2+\xi_n^-v_{mn}^2). \tag{2.146}$$

由式 (2.139b) 得，忽略自旋，

$$t_mc_{m+1}^\dagger+t_{m-1}c_{m-1}^\dagger=\sum_n\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{mn}a_n^\dagger+(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{mn}a_n^\dagger\right], \tag{2.147}$$

带入 $c_{m+1}^\dagger=\sum_n[u_{m+1,n}a_n^\dagger+v_{m+1,n}b_n^\dagger]$，$c_{m-1}^\dagger=\sum_n[u_{m-1,n}a_n^\dagger+v_{m-1,n}b_n^\dagger]$ 得

$$\begin{aligned}&\sum_n\left[t_mu_{m+1,n}a_n^\dagger+t_mv_{m+1,n}b_n^\dagger+t_{m-1}u_{m-1}a_n^\dagger+t_{m-1}v_{m-1,n}b_n^\dagger\right]\\=&\sum_n\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{mn}a_n^\dagger+(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{mn}b_n^\dagger\right].\end{aligned} \tag{2.148}$$

对比 $a_n^\dagger,b_n^\dagger$ 的系数，得

$$t_mu_{m+1,n}+t_{m-1}u_{m-1,n}=(\xi_n^+\epsilon_m)u_{mn}, \tag{2.149a}$$

$$\Rightarrow u_{m+1,n}=\frac{1}{t_m}\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{mn}-t_{m-1}u_{m-1,n}\right], \tag{2.149b}$$

$$t_mv_{m+1,n}+t_{m-1}v_{m-1,n}=(\xi_n^+\epsilon_m)v_{mn}, \tag{2.149c}$$

$$\Rightarrow u_{m+1,n}=\frac{1}{t_m}\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{mn}-t_{m-1}u_{m-1,n}\right], \tag{2.149d}$$

注意，$c_{m+1}=\sum_n[u_{m+1,n}a_n+v_{m+1,n}b_n]$，$c_{m-1}=\sum_n[u_{m-1,n}a_n+v_{m-1,n}b_n]$, 分别取 (2.147) 与 c_{m+1}，c_{m-1} 取反对易式可得，

$$t_m=\sum_n\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{m+1,n}u_{mn}+(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{m+1,n}v_{mn}\right], \tag{2.150a}$$

$$t_{m-1}=\sum_n\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{m-1,n}u_{mn}+(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{m-1,n}v_{mn}\right], \tag{2.150b}$$

将式 (2.149b)、(2.149d) 带入式 (2.150a) 可得，

$$\begin{aligned}t_m^2=&\sum_n\left[(\xi_n^+-\varepsilon_m)[(\xi_n^+-\varepsilon_m)u_{mn}-t_{m-1}u_{m-1,n}]u_{mn}\right.\\&\left.+(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{mn}[(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{mn}[(\xi_n^--\varepsilon_m)v_{mn}-t_{m-1}v_{m-1,n}]\right]\\=&\sum_n\left\{(\xi_n^{+^2}-2\varepsilon_m\xi_n^++\varepsilon_m^2)u_{mn}^2-(\xi_n^+-\varepsilon_m)t_{m-1}u_{m-1,n}u_{mn}\right.\\&\left.+(\xi_n^{-^2}-2\varepsilon_m\xi_n^-+\varepsilon_m^2)v_{mn}^2-(\xi_n^--\varepsilon_m)t_{m-1}v_{m-1,n}v_{mn}\right\}\end{aligned} \tag{2.151}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_n \left[\xi_n^{+^2} u_{mn}^2 + \xi_n^{-^2} v_{mn}^2\right] \\
&\quad + \sum_n \left[\varepsilon_m^2(u_{mn}^2 + v_{mn}^2) - 2\varepsilon_m \xi_n^+ u_{mn}^2 - 2\varepsilon_m \xi_n^- v_{mn}^2\right] \\
&\quad + \sum_n \left[-(\xi_n^+ - \varepsilon_m) t_{m-1} u_{m-1,n} u_{mn} - (\xi_n^- - \varepsilon_m) t_{m-1} v_{m-1,n} v_{mn}\right],
\end{aligned}
$$

上式中第二项，由 $[c_m, c_m^\dagger]_+ = 1$ 可得 $\sum_n (u_{mn}^2 + v_{mn}^2) = 1$，同时利用式 (2.146) 可得第二项为

$$
\sum_n \left[\varepsilon_m^2(u_{mn}^2 + v_{mn}^2) - 2\varepsilon_m \xi_n^+ u_{mn}^2 - 2\varepsilon_m \xi_n^- v_{mn}^2\right] = -\varepsilon_n^2, \tag{2.152}
$$

对于第三项，

$$
\begin{aligned}
&\sum_n \left[-(\xi_n^+ - \varepsilon_m) t_{m-1} u_{m-1,n} u_{mn} - (\xi_n^- - \varepsilon_m) t_{m-1} v_{m-1,n} v_{mn}\right] \\
&= -\sum_n \left[(\xi_n^+ - \varepsilon_m) u_{m-1,n} u_{mn} + (\xi_n^- - \varepsilon_m) v_{m-1,n} v_{mn}\right] t_{m-1} \\
&= -t_{m-1}^2,
\end{aligned} \tag{2.153}
$$

于是有，

$$
t_m^2 = \sum_n \left[(\xi_m^+)^2 u_{mn}^2 + (\xi_m^-)^2 v_{mn}^2\right] - t_{m-1}^2 - \varepsilon_m^2, \tag{2.154}
$$

从而确定所剩下的参数的递推关系，

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_0 &= \frac{1}{\xi_0} \int_{-1}^{1} d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \varepsilon \ , \\
t_0^2 &= \frac{1}{\xi_0} \sum_m [(\xi_m^+ - \varepsilon_0)^2 (\gamma_m^+)^2 + (\xi_m^- - \varepsilon_0)^2 (\gamma_m^-)^2] \ , \\
u_{1m} &= \frac{1}{t_0} (\xi_m^+ - \varepsilon_0) u_{0m} \ , \\
u_{1m} &= \frac{1}{t_0} (\xi_m^- - \varepsilon_0) v_{0m} \ .
\end{aligned} \tag{2.155}
$$

对于 $n \geq 1$，

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_n &= \sum_m \left(\xi_m^+ u_{nm}^2 + \xi_m^- v_{nm}^2\right) \ , \\
t_n^2 &= \sum_m [(\xi_m^+)^2 u_{nm}^2 + (\xi_m^-)^2 v_{nm}^2] - t_{n-1}^2 - \varepsilon_n^2 \ , \\
u_{n+1,m} &= \frac{1}{t_n} \left[(\xi_m^+ - \varepsilon_n) u_{nm} - t_{n-1} u_{n-1,m}\right] \ , \\
u_{n+1,m} &= \frac{1}{t_n} \left[(\xi_m^+ - \varepsilon_n) v_{nm} - t_{n-1} v_{n-1,m}\right] \ .
\end{aligned} \tag{2.156}
$$

- 迭代对角化

当我们得到如下形式的链状哈密顿量，

$$\begin{aligned} H = H_{imp} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} \left[f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right] \\ + \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \left[\varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + t_n \left(c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \right) \right], \end{aligned} \tag{2.157}$$

处理这个哈密顿量，上式可以看做一些列的 H_N，在 $N \to \infty$ 的情况下趋近 H，

$$H = \lim_{N \to \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N, \tag{2.158}$$

其中，

$$\begin{aligned} H_N = \Lambda^{(N-1)/2} \Big[H_{imp} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}) \\ + \sum_{\sigma n=0}^{N} \varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + \sum_{\sigma n=0}^{N-1} t_n (c_{n\sigma}^{\dagger}) c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \Big], \end{aligned} \tag{2.159}$$

同时有，

$$\begin{aligned} H_{N+1} = \sqrt{\Lambda} H_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} \varepsilon_{N+1} c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} \\ + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} t_N (c_{N\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma}), \end{aligned} \tag{2.160}$$

以及，

$$H_0 = \Lambda^{-1/2} \Big[H_{imp} + \sum_{\sigma} \varepsilon_0 c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}) \Big], \tag{2.161}$$

在实际的计算过程中处理的就是 (2.160) 和 (2.161)，从 H_0 出发，求得相应的本征值和本征态。然后增加一个格点，扩充相应的希尔伯特空间，并求得相应的哈密顿量矩阵，并将其对角化，并只保存能量最低的 M_s 个本征态，然后继续增加格点，重复这个过程直到达到设定的链长，并利用这个过程中得到的所有本征值与本征态计算相应的物理可观测量。

2.3.2　杂化展开连续时间量子蒙特卡罗

接下来将介绍杂化展开连续时间量子蒙特卡罗方法。

- 配分函数的展开形式

首先我们推导配分函数的展开形式，考虑一个哈密顿量由两部分组成，$H = H_1 + H_2$，将配分函数按其中一项展开，然后对各阶展开项采样统计进行物理量

的计算。在相互作用绘景下，任意算符的时间演化可以表示为，

$$\mathcal{O}(\tau) = \mathrm{e}^{\tau H_1}\mathcal{O}\mathrm{e}^{-\tau H_1}. \tag{2.162}$$

定义算符 $U(\beta)$,

$$U(\beta) = \mathrm{e}^{\beta H_1}\mathrm{e}^{-\beta H}, \tag{2.163}$$

于是配分函数可以表示为，

$$Z = \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta H_1}U(\beta)\right]. \tag{2.164}$$

由 $U(\beta)$ 的定义有，

$$\frac{\mathrm{d}U(\beta)}{\mathrm{d}\beta} = -H_2(\beta)U(\beta), \tag{2.165}$$

$$U(\beta) = \mathcal{T}\mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau H_2(\tau)}. \tag{2.166}$$

其中 $\mathcal{T}$ 为编时算符。将式 (2.166) 代入 (2.164) 中，可得：

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta H_1}\mathcal{T}\mathrm{e}^{-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau H_2(\tau)}\right] \\ &= \sum_k (-1)^k \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta \mathrm{d}\tau_k \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta H_1}H_2(\tau_k)\cdots H_2(\tau_1)\right] \\ &= \sum_k \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \cdots \int_{\tau_0}^\beta \mathrm{d}\tau_k \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta H_1}H_2(\tau_k)\cdots H_2(\tau_1)\right]. \end{aligned} \tag{2.167}$$

考虑一个单杂质 Anderson 模型，

$$H = H_{\mathrm{bath}} + H_{\mathrm{loc}} + H_{\mathrm{hyb}}, \tag{2.168}$$

其中 H_{bath} 为无相互作用的浴，

$$H_{\mathrm{bath}} = \sum_{p,\sigma} \epsilon_p c^\dagger_{p\sigma} c_{p\sigma}, \tag{2.169}$$

其中 p 为动量指标，σ 为自旋指标。

H_{loc} 为局域杂质项，其可以进一步分为两项，

$$H_{\mathrm{loc}} = H^0_{\mathrm{loc}} + H^I_{\mathrm{loc}}, \tag{2.170}$$

$$H^0_{\mathrm{loc}} = -\mu(n_\uparrow + n_\downarrow), \tag{2.171}$$

$$H^I_{\mathrm{loc}} = U n_\uparrow n_\downarrow. \tag{2.172}$$

分别为无相互作用项和相互作用项，注意这里为了简单起见相互作用项只包含了四费米子算符，事实上还可以包含更高阶项。

H_{hyb} 为杂化项，最常见的形式如下：

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{hyb}} &= \sum_{p\sigma}(V_p^{\sigma} c_{p\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + V_p^{\sigma *} d_{\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma}) \\ &= \tilde{H}_{\mathrm{hyb}} + \tilde{H}_{\mathrm{hyb}}^{\dagger}, \end{aligned} \tag{2.173}$$

这里的 V_p^{σ} 为 c 电子与 d 电子之间的杂化强度。

现在将哈密顿量分成两个部分 $H = H_1 + H_2$，其中：

$$H_1 = H_{\mathrm{bath}} + H_{\mathrm{loc}}, \tag{2.174}$$

$$H_2 = H_{\mathrm{hyb}}. \tag{2.175}$$

代入到 (2.167) 中，由于 $H_2 = H_{\mathrm{hyb}} = \tilde{H}_{\mathrm{hyb}} + \tilde{H}_{\mathrm{hyb}}^{\dagger}$，在两个共轭的子项中，一个在导带产生电子，在杂质带消灭电子，另一个在导带消灭电子，在杂质带产生电子，所以只有两者成对出现的情况下才会有非零项，于是有：

$$\begin{aligned} Z = & \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^{\beta} \mathrm{d}\tau_k \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1' \cdots \int_{\tau_{k-1}'}^{\beta} \mathrm{d}\tau_k' \mathrm{Tr}\Big[\mathcal{T}_{\tau} \mathrm{e}^{-\beta H_1} \tilde{H}_{\mathrm{hyb}}\left(\tau_k\right) \tilde{H}_{\mathrm{hyb}}^{\dagger}\left(\tau_k'\right) \\ & \cdots \tilde{H}_{\mathrm{hyb}}\left(\tau_1\right) \tilde{H}_{\mathrm{hyb}}^{\dagger}\left(\tau_1'\right)\Big] \\ = & \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^{\beta} \mathrm{d}\tau_k \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1' \cdots \int_{\tau_{k-1}'}^{\beta} \mathrm{d}\tau_k' \sum_{\substack{j_1,\cdots,j_k \\ j_1',\cdots,j_k'}} \sum_{\substack{p_1,\cdots,p_k \\ p_1',\cdots,p_k'}} V_{p_1}^{j_1} V_{p_1'}^{j_1' *} \cdots V_{p_k}^{j_k} V_{p_k'}^{j_k' *} \\ & \times \mathrm{Tr}\left[\mathcal{T} \mathrm{e}^{-\beta H_1} d_{j_k}\left(\tau_k\right) c_{p_k}^{\dagger}\left(\tau_k\right) c_{p_k'} d_{j_k'}^{\dagger}\left(\tau_k'\right) \cdots d_{j_1}\left(\tau_1\right) c_{p_1}^{\dagger} c_{p_1'}\left(\tau_1'\right) d_{j_1'}^{\dagger}\left(\tau_1'\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.176}$$

由于算符 $c(c^{\dagger})$ 与 $d(d^{\dagger})$ 分别作用于导带电子空间和杂质电子空间，而 H_1 不包含 $c(c^{\dagger})$ 与 $d(d^{\dagger})$ 的杂化项，所以上式可以进一步简化，

$$\begin{aligned} Z = & \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^{\beta} \mathrm{d}\tau_k \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1' \cdots \int_{\tau_{k-1}'}^{\beta} \mathrm{d}\tau_k' \sum_{\substack{j_1,\cdots,j_k \\ j_1',\cdots,j_k'}} \sum_{\substack{p_1,\cdots,p_k \\ p_1',\cdots,p_k'}} V_{p_1}^{j_1} V_{p_1'}^{j_1' *} \cdots V_{p_k}^{j_k} V_{p_k'}^{j_k' *} \\ & \times \mathrm{Tr}_d \left[\mathcal{T} \mathrm{e}^{-\beta H_{\mathrm{loc}}} d_{j_k}\left(\tau_k\right) d_{j_k'}^{\dagger}\left(\tau_k'\right) \cdots d_{j_1}\left(\tau_1\right) d_{j_1'}^{\dagger}\left(\tau'\right)\right] \\ & \times \mathrm{Tr}_c \left[\mathcal{T} \mathrm{e}^{-\beta H_{\mathrm{bath}}} c_{p_k}^{\dagger}\left(\tau_k\right) c_{p_k'}\left(\tau_k'\right) \cdots c_{p_1}^{\dagger}\left(\tau_1\right) c_{p_1'}\left(\tau'\right)\right]. \end{aligned} \tag{2.177}$$

- 无相互作用部分的权重

首先处理 $c(c^\dagger)$ 相关的项，注意到 H_{bath} 中无相互作用项，也就是说 $H_{\text{bath}} = \sum_{p\sigma} \epsilon_p c^\dagger_{p\sigma} c_{p\sigma}$ 中只包含两算符项，所以我们可以将 $c(c^\dagger)$ 积分掉，得到：

$$\begin{aligned} Z_{\text{bath}} &= \mathrm{Tr} e^{-\beta H_{\text{bath}}} \\ &= \mathrm{Tr}_c \mathrm{e}^{-\beta \sum_{p\sigma} \epsilon_{p\sigma} c^\dagger_{p\sigma} c_{p\sigma}} \\ &= \prod_\sigma \prod_p \mathrm{Tr} \left[1 + \frac{-\beta \epsilon_{p\sigma} c^\dagger_{p\sigma} c_{p\sigma}}{1!} + \cdots \right] \\ &= \prod_\sigma \prod_p \mathrm{Tr} \left[1 + c^\dagger_{p\sigma} c_{p\sigma} \left(\mathrm{e}^{-\beta \epsilon_{p\sigma}} - 1 \right) \right] \\ &= \prod_\sigma \prod_p \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta \epsilon_{p\sigma}} \right). \end{aligned} \tag{2.178}$$

考虑 $k = 1$ 的情况，即一阶项有，

$$\begin{aligned} &\frac{1}{Z_{\text{bath}}} \sum_p V_p^\sigma V_p^{\sigma *} \mathrm{Tr}_c \left[e^{-\beta H_{\text{bath}}} e^{\tau H_{\text{bath}}} c^\dagger_{p\sigma} e^{(-\tau - \tau') H_{\text{bath}}} c_{p\sigma} e^{-\beta H_{\text{bath}}} e^{-\tau' H_{\text{bath}}} \right] \\ &\quad = \sum_p |V_p^\sigma|^2 \frac{1}{1 + e^{-\beta \epsilon_p}} e^{-(\tau - \tau') \epsilon_p}, \quad \tau < \tau', \end{aligned} \tag{2.179}$$

以及，

$$\begin{aligned} &\frac{1}{Z_{\text{bath}}} \sum_p V_p^\sigma V_p^{\sigma *} \mathrm{Tr}_c \left[e^{-\beta H_{\text{bath}}} e^{\tau H_{\text{bath}}} c^\dagger_{p\sigma} e^{(-\tau - \tau') H_{\text{bath}}} c_{p\sigma} e^{-\beta H_{\text{bath}}} e^{-\tau' H_{\text{bath}}} \right] \\ &\quad = \sum_p |V_p^\sigma|^2 \frac{1}{1 + e^{-\beta \epsilon_p}} e^{-(\beta - (\tau - \tau')) \epsilon_p}, \quad \tau > \tau'. \end{aligned} \tag{2.180}$$

于是定义反周期杂化函数，

$$\Delta_{lm}(\tau) = \sum_p \frac{V_p^{l*} V_p^m}{1 + e^{-\beta \epsilon_p}} \times \begin{cases} -\mathrm{e}^{-\epsilon_p (\tau_1 - \tau_1' - \beta)}, & \tau > 0, \\ \mathrm{e}^{-\epsilon_p (\tau_1 - \tau_1')}, & \tau < 0, \end{cases} \tag{2.181}$$

由于 H_{bath} 是无相互作用的，所以推广到 k 阶的时候可以用 Wick 定理，得到：

$$\begin{aligned} &\frac{1}{Z_{\text{bath}}} \mathrm{Tr}_c \Big[\mathcal{T} e^{-\beta H_{\text{bath}}} \sum_{p_1, \cdots, p_k} \sum_{p_1', \cdots, p_k'} V_{p_1}^{j_1} V_{p_1'}^{j_1' *} \cdots V_{p_k}^{j_k} V_{p_k'}^{j_k' *} \\ &\qquad c^\dagger_{p_k} (\tau_k) c_{p_k'} (\tau_k') \cdots c^\dagger_{p_1} (\tau_1) c_{p_1'} (\tau_1') \Big] = \det \mathbf{\Delta}, \end{aligned} \tag{2.182}$$

其中，$\mathbf{\Delta}$ 为一个由杂化函数构成的大小为 $k\times k$ 的矩阵：

$$\mathbf{\Delta}=\det\begin{bmatrix}\Delta_{j_1j_1'}\left(\tau_1-\tau_1'\right) & \Delta_{j_1j_2'}\left(\tau_1-\tau_2'\right) & \cdots & \Delta_{j_1j_k'}\left(\tau_1-\tau_k'\right)\\ \Delta_{j_2j_1'}\left(\tau_2-\tau_1'\right) & \Delta_{j_2j_2'}\left(\tau_2-\tau_2'\right) & \cdots & \Delta_{j_2j_k'}\left(\tau_2-\tau_k'\right)\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \Delta_{j_kj_1'}\left(\tau_2-\tau_1'\right) & \Delta_{j_kj_2'}\left(\tau_2-\tau_2'\right) & \cdots & \Delta_{j_kj_k'}\left(\tau_k-\tau_k'\right)\end{bmatrix}. \tag{2.183}$$

需要注意的是，杂化函数与 Weiss 场可以通过 $\mathcal{G}_0(i\omega_n)=(i\omega_n+\mu-\epsilon_d-\Delta(i\omega_n))^{-1}$ 联系起来。后面我们可以看到，实际的计算中往往直接处理的是 $\mathbf{\Delta}$ 的逆矩阵，$\mathbf{M}=\mathbf{\Delta}^{-1}$。

现在配分函数可以写作：

$$\begin{aligned}Z=Z_{\text{bath}}\sum_k\iiint\mathrm{d}\tau_1\cdots\mathrm{d}\tau_k'\sum_{j_1,\cdots,j_k}\sum_{j_1',\cdots,j_k'}\\ \times\mathrm{Tr}_d\left[\mathcal{T}_\tau\mathrm{e}^{-\beta H_{\text{loc}}}d_{j_k}\left(\tau_k\right)d_{j_k'}^\dagger\left(\tau_k'\right)\cdots d_{j_1}\left(\tau_1\right)d_{j_1'}^\dagger\left(\tau_1'\right)\right]\det\mathbf{\Delta}.\end{aligned} \tag{2.184}$$

同时我们将行列式部分记为，$W_{\text{det}}=\det\mathbf{\Delta}=\mathcal{D}$。

- 相互作用部分的权重

接下来我们考虑处理局域 d 电子部分，令

$$W_{\text{loc}}=\mathrm{Tr}_d\left[\mathcal{T}_\tau\mathrm{e}^{-\beta H_{\text{loc}}}d_{j_k}\left(\tau_k\right)d_{j_k'}^\dagger\left(\tau_k'\right)\cdots d_{j_1}\left(\tau_1\right)d_{j_1'}^\dagger\left(\tau_1'\right)\right]. \tag{2.185}$$

当 $H_{\text{loc}}=Un_\uparrow n_\downarrow$ 时，即只具有密度-密度相互作用的形式，d 电子的产生和消灭算符总是成对出现，交替排列。我们可以用段表示法来表示其位形，如图2.8所示，由于 H_{loc} 在占据数表象下是对角的，

$$H_{\text{loc}}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\mu & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\mu & 0\\ 0 & 0 & 0 & U-2\mu\end{bmatrix}, \tag{2.186}$$

对于有 N 个 flavor 的位形中，计算可得局域的权重为，

$$w_{\text{loc}}(x)=s\mathrm{e}^{\mu\sum_j^n L_j}\mathrm{e}^{-\sum_{i<j}^n(U_{ij}O_{ij})}. \tag{2.187}$$

其中 L_j 为第 j 个 flavor 中的段的长度之和，O_{ij} 为第 i 与第 j 个 flavor 之间的交叠区域总长度，s 与编时算符相关。

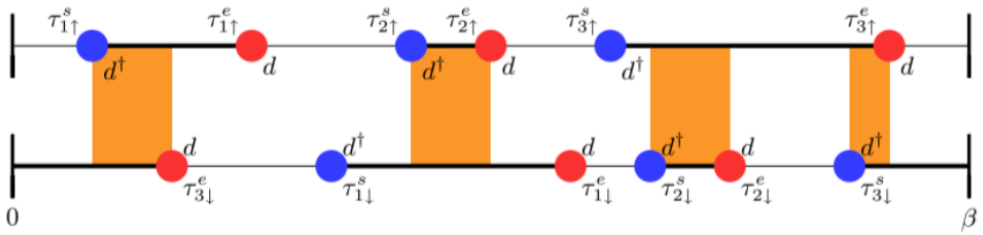

图 2.8 段表示法下的位形示意图。其中上下两条线表示不同自旋方向的虚时轴，红色圆点对应一个消灭算符，蓝色圆点对应产生算符。黑色实线为表示一个段，橙色的阴影区域称为交叠区域，对应双占据态[52]。

Figure 2.8 An illustration of the segment configuration. The two lines represent the imaginary time axes of different spin directions (flavors). The red circles represent the annihilation operators at different imaginary time while the blue circles represent to the creation operators. The black solid lines donate the single occupied states and the orange shaded areas represent the doubly occupied states[52].

综上，给定一个位形，其权重可以写成，

$$w = w_{\text{loc}} w_{\text{det}} = \mathcal{F}\mathcal{D}. \tag{2.188}$$

- 位形更新与接受概率

有了位形权重，现在考虑位形的更新以及相应的接受概率。在此为了简单起见，我们只考虑最简单的几种更新方式，插入（删除）一个段或者反段。

1. 插入段：在当前位形上选择某一自旋 flavor，插入一个段，在所插入的段不绕过 $\tau = \beta$ 的情况下，$\tau_s < \tau_e$，否则 $\tau_s > \tau_e$。如果当前 flavor 为满占据，则放弃插入。图2.9为其示意图，这种更新的接受概率为：

$$P_{\text{add-seg}} = \min\left\{1, \frac{\mathcal{D}_{k+1}}{\mathcal{D}_k}\frac{\beta l_{max}}{k+1} e^{\tilde{l}\mu - \delta_o U}\right\}, \tag{2.189}$$

其中 $\tilde{l}$ 为插入段的长度，l_{max} 为当产生算符位置确定后，消灭算符可以保留的最长时间，δ_o 表示插入新段之后，交叠区域的变化量。当插入新段之后，相应的杂化函数矩阵 $\mathbf{\Delta}$ 维度增加 1，接受概率中存在 $k+1$ 维矩阵的行列式与 k 为矩阵行列式之比，$\mathcal{D}_{k+1}/\mathcal{D}_k$。

2. 删除段：在当前位形上选择某一 flavor，删除一个段，其接受概率为：

$$P_{\text{rm-seg}} = \min\left\{1, \frac{\mathcal{D}_{k-1}}{\mathcal{D}_k}\frac{k}{\beta l_{max}} e^{-\tilde{l}\mu + \delta_o U}\right\}. \tag{2.190}$$

3. 插入反段：在当前位形上选择某一 flavor，插入一个反段，其接受概率为：

$$P_{\text{add-anti}} = \min\left\{1, \frac{\mathcal{D}_{k+1}}{\mathcal{D}_k}\frac{\beta l_{max}}{k+1} e^{-\tilde{l}\mu + \delta_o U}\right\}. \tag{2.191}$$

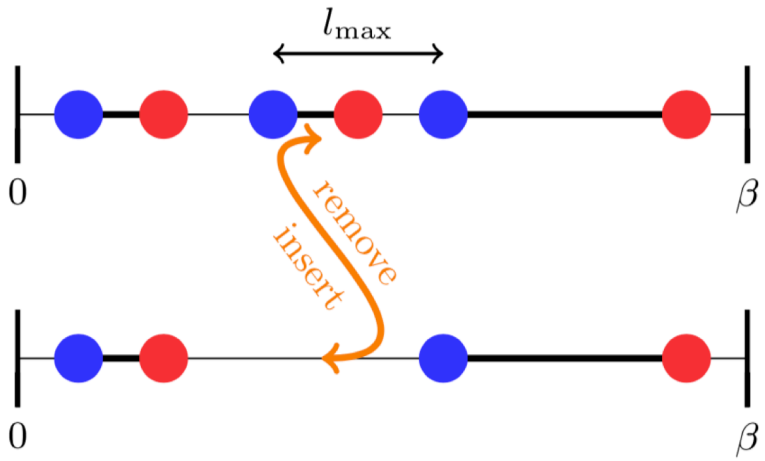

图 2.9 段表示法中插入和删除一个段的示意图。[52]。

Figure 2.9 A segment insertion update and removal update in the segment representation [52].

4. 删除反段：在当前位形上选择某一 flavor，删除一个反段，其接受概率为：

$$P_{\text{rm-anti}} = \min\left\{1, \frac{\mathcal{D}_{k-1}}{\mathcal{D}_k}\frac{k}{\beta l_{max}} e^{-\tilde{l}\mu+\delta_o U}\right\}. \tag{2.192}$$

从原则上讲，上述 4 种更新方式已经可以达到遍历性的要求，而在实际的应用中，还可以有段平移，全局翻转等等操作，以提高抽样效率。

实际的计算中，上述接收概率中行列式的比值可以有快速的计算方法。由 $\mathbf{M} = \mathbf{\Delta}^{-1}$，所以

$$\frac{\mathcal{D}_{\text{new}}}{\mathcal{D}_{\text{old}}} = \frac{\det \mathbf{M}_{\text{old}}}{\det \mathbf{M}_{\text{new}}}. \tag{2.193}$$

每次只插入一个段或者反段的时候，$\mathbf{M}^{-1}$ 增加一行一列，

$$M^{-1}_{\text{new}} = \left[\begin{array}{ccc|c} & & & \Delta_{1n} \\ & M^{-1}_{\text{old}} & & \Delta_{2n} \\ & & & \vdots \\ \hline \Delta_{n1} & \Delta_{n2} & \cdots & \Delta_{nn} \end{array}\right], \tag{2.194}$$

利用 Shermann-Morrison-Woodbury 公式[52]，

$$\left(A^{-1} + u \otimes v\right)^{-1} = A - \frac{1}{1 + vAu}(Au) \otimes (vA), \tag{2.195}$$

以及

$$\det\left(A^{-1} + u \otimes v\right) \det(A) = 1 + vAu, \tag{2.196}$$

其中 u 和 v 分别为一列和一行向量。可以得到,

$$M_{\text{new}}^{-1}=\left[\begin{array}{ccc|c} & M_{\text{old}}^{-1} & & \begin{matrix}0\\0\\\vdots\end{matrix} \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 \end{array}\right]+p\left[\begin{array}{c} L_{1n} \\ L_{2n} \\ \vdots \\ \hline -1 \end{array}\right]\otimes\left[\begin{array}{ccc|c} R_{n1}, & R_{n2}, & \cdots & -1 \end{array}\right], \tag{2.197}$$

其中

$$\begin{aligned} L_{ij}&=\sum_{l<n}M_{il}^{\text{old}}\Delta_{lj}, \\ R_{ij}&=\sum_{l<n}\Delta_{il}M_{lj}^{\text{old}}, \\ \frac{\mathcal{D}_{\text{new}}}{\mathcal{D}_{\text{old}}}&=\frac{1}{p}=\Delta_{nn}-\sum_{ll'<n}\Delta_{nl}M_{ll'}^{\text{old}}\Delta_{l'n}. \end{aligned} \tag{2.198}$$

而对于删除一个段或者反段的情况，$\mathbf{\Delta}$ 移除一行一列，假设移除第 p 行第 q 列,

$$M_{ij}^{\text{new}}=M_{ij}^{\text{old}}-\frac{M_{ip}^{\text{old}}M_{qj}^{\text{old}}}{M_{pq}^{\text{old}}}, \tag{2.199}$$

其中 $i\neq p$ 和 $j\neq q$，同时行列式比值是

$$\frac{\mathcal{D}_{\text{new}}}{\mathcal{D}_{\text{old}}}=M_{pq}^{\text{old}}. \tag{2.200}$$

- 物理量的测量

这里我们给出在段表示法中一些主要的物理量测量公式，如局域虚时格林函数:

$$G(\tau)=\langle-\sum_{ij}\frac{1}{\beta}\delta\left(\tau,\tau_i-\tau_j'\right)M_{ij}\rangle_{MC}, \tag{2.201}$$

其中

$$\delta\left(\tau,\tau'\right)=\begin{cases}\delta\left(\tau-\tau'\right), & \tau'>0, \\ -\delta\left(\tau-\tau'-\beta\right), & \tau'<0.\end{cases} \tag{2.202}$$

以及虚频格林函数:

$$G\left(i\omega_n\right)=\langle-\sum_{ij}\frac{1}{\beta}\mathrm{e}^{i\omega_n(\tau_i-\tau_j')}M_{ij}\rangle_{MC}. \tag{2.203}$$

某一个 flavor 上的电子占据数:

$$\langle n_i\rangle=\frac{L_i}{\beta}, \tag{2.204}$$

系统的动能：

$$E_{\mathrm{kin}} = \frac{1}{\beta}\langle k\rangle, \tag{2.205}$$

其中 k 为展开阶数。系统的势能（单带）：

$$E_{\mathrm{pot}} = U\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow}\rangle. \tag{2.206}$$

需要注意的是，段表示法只适用于密度-密度形式的相互作用，如果是广义的相互作用，可以用广义矩阵算法来计算。

第 3 章　半满周期性安德森模型中的杂化涨落

本章我们将利用 DQMC 方法来研究半满周期性 Anderson 模型中的杂化涨落。通过对杂化关联函数的计算和其在不同的参数范围内的行为分析我们得到了新的相图，该相图揭示了在非杂化的 Mott 绝缘态与完全杂化的 Kondo 绝缘态中间存在一个过渡区域，在这个过渡区域内存在着量子杂化涨落，相应地在 $CeCoIn_5$ 的 ARPES 实验中表现为所观测到的能带弯曲现象和直接杂化带隙，这与最近的超快激光泵浦-探测实验所提出的物理图像一致，并直接将能带弯曲与杂化涨落联系起来，证实了实验所提出的两阶段杂化图像。

3.1　研究背景

重费米子材料是为研究强关联电子系统中的局域巡游转变提供一个很好的模型[9,23,62]。理论上，这种转变来自于局域和巡游电子的集体杂化[39,63–65]。平均场近似[66–70] 通过考虑一个静态均匀的杂化得到了很多有趣的结果[71–75]，同时定义了一个特征相干温度来区分杂化态和非杂化态[76–78]，这种杂化表现为费米面附近导带电子的能带弯曲现象，同时这标志着重电子的出现。然而这种简单的物理图像不能够解释在第一章所介绍的在 $CeCoIn_5$ 的 ARPES 实验[41] 中在远高于相干温度之上时所观测到的能带弯曲的现象。而后在 $CeCoIn_5$ 的超快激光泵浦-探测实验中，基于观测到的反常准粒子软化人们提出了两阶段杂化的物理图像[42]，表明系统中存在一个没有带隙却表现出杂化涨落的态，这个态是平均场的描述所没能揭示的。虽然系统的输运和能带性质还没有一个准确的微观对应，但是相干态和杂化态的区别仍然引起了对于传统物理图像的挑战，通过什么物理量的计算来说明和理解这个两阶段过程是值得思考的问题。

一直以来，杂化涨落都被认为在重费米子物理中的扮演着重要角色[79–81]，也可能是许多重要的重费米子现象的基础[8,82–86]。不幸的是对其精确的解析研究却是非常困难的，这阻碍了对于重费米子物理的探索。为了避免解析上的困难，在这个工作中，我们使用行列式蒙特卡罗 (DQMC) 方法来研究重费米子系统中的杂化涨落。DQMC 被广泛用于重费米子体系的研究并得到了许多重要的结果[87–90]，但是对于杂化关联的研究却很少。虽然为了避免符号问题，我们的

计算限制在半满的情况下，DQMC 的数值结果仍然给出了一些超越平均场的普适性质。为了回答在周期性 Anderson 模型中是否存在一个如同实验中所提出的两阶段的杂化过程，以及如何同能带弯曲和晶格的相干现象联系起来等问题，杂化涨落的研究是非常重要的。

3.2 模型和方法

我们考虑二维正方格点上的周期性 Anderson 模型，其哈密顿量如下：

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle ij\rangle\sigma} (c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + c^{\dagger}_{j\sigma} c_{i\sigma}) + V \sum_{i\sigma} (f^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma} + c^{\dagger}_{i\sigma} f_{i\sigma}) \\ & + E_f \sum_{i\sigma} f^{\dagger}_{i\sigma} f_{i\sigma} + U \sum_{i} \left(n^{f}_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n^{f}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \tag{3.1}$$

其中，$c(c^{\dagger})$ 和 $f(f^{\dagger})$ 分别表示导带电子与局域电子的消灭（产生）算符，$\langle ij\rangle$ 表示只考虑最近邻的跃迁，$t = 1$ 作为能量单位。在计算中 f 电子之间库仑排斥作用强度 $U = 6$，设置 $E_f = 0$ 来保持粒子空穴对称以避免符号问题，V 为 c 电子与 f 电子之间的杂化强度。

为了研究杂化关联，我们首先定义杂化场，$O_i = \sum_{\sigma}(c^{\dagger}_{i\sigma} f_{i\sigma} + f^{\dagger}_{i\sigma} c_{i\sigma})$ 以及相应的关联函数：

$$L_{ij}(\tau) = -\left\langle \mathcal{T}_{\tau} \left[O_i(\tau) - \langle O_i\rangle\right]\left[O_j(0) - \langle O_j\rangle\right]\right\rangle, \tag{3.2}$$

其中 $\mathcal{T}_{\tau}$ 为虚时 τ 的编时算符。与 Kondo 晶格模型的平均场处理不同的是，这里的平均值 $\langle O_i\rangle$ 总是非零的，因此并不能很好的区分杂化或者非杂化态[91]，所以在实际的计算中被作为背景减去，只留下动力学的涨落部分。我们的计算考虑 8×8 的正方格点，蒙特卡罗计算中 $\beta = M\Delta\tau, M = 80$，并验证过更大的晶格系统以及划分更多的时间段，得到了一致的结果。

杂化谱函数，$A_{\mathbf{q}}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\, L_{\mathbf{q}}(\omega)$，可以通过对虚时杂化关联函数作最大熵计算得到，

$$L_{\mathbf{q}}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{e^{-\beta\omega} - 1} A_{\mathbf{q}}(\omega), \tag{3.3}$$

其中，$L_{\mathbf{q}}(\tau) = \frac{1}{N}\sum_{ij} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} L_{ij}(\tau)$。在计算得到杂化谱的虚部之后，相应的实部可以通过 Kramers-Kronig 关系计算得到，

$$\mathrm{Re}\, L_{\mathbf{0}}(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\, L_{\mathbf{0}}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \tag{3.4}$$

同样，系统的费米型谱函数也可以通过类似的方法得到。

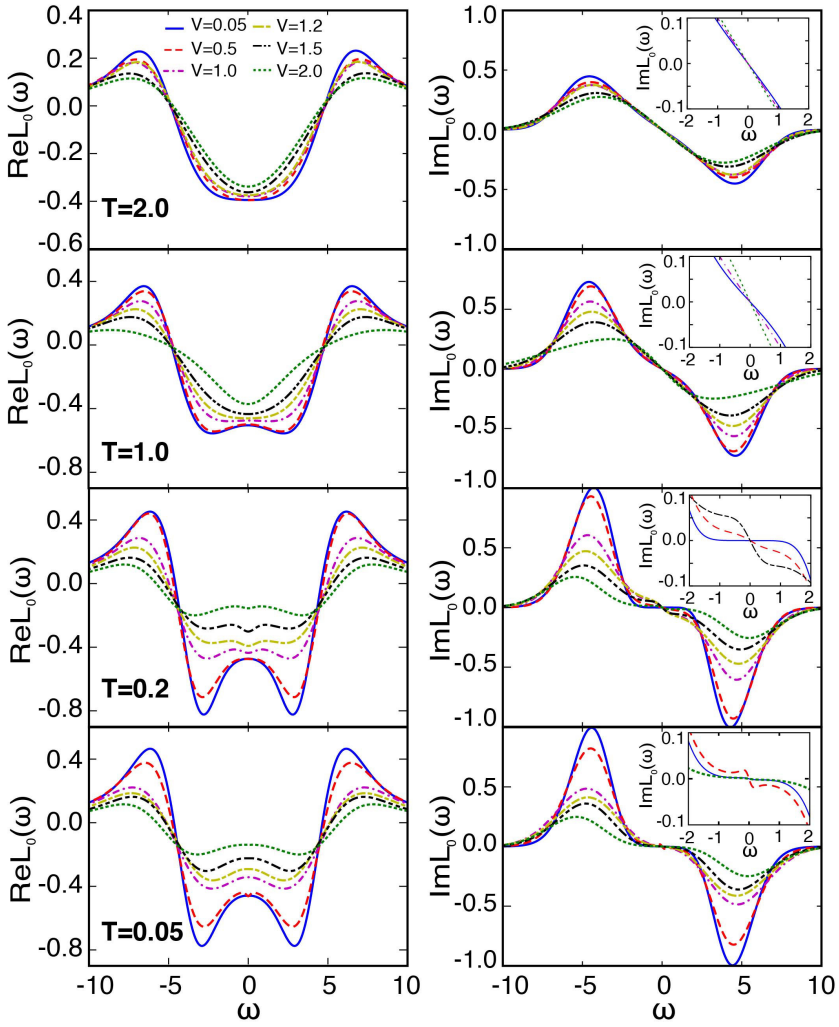

图 3.1 杂化关联函数 $L_0(\omega)$ 在不同参数 V 和 T 下的行为。插图为虚部在 $\omega = 0$ 附近的放大图。

Figure 3.1 The behaviors of the hybridization correlation function $L_0(\omega)$ for different parameters V and T. The inserts are enlarged plots around $\omega = 0$.

3.3　计算结果

3.3.1　不同参数下的杂化关联函数

为了系统地分析杂化涨落，我们计算了不同参数 β, V 下的杂化关联函数。其结果如图 3.1所示：在高温 $T = 2.0$ 的时候，$\boldsymbol{L_0}(\omega)$ 随着 V 的变化只发生很小的变化，并且由于 f 电子在上下 Hubbard 带之间的激发，其在 $\omega \approx \pm U$ 处出现两个峰。$\mathrm{Im}\, \boldsymbol{L_0}(\omega)$ 在 $\omega = 0$ 处的斜率不为零并且在小 V 的情况下基本保持不变，这是由于它们来自于未杂化的 f 电子与导带电子的热激发。在 $T = 1.0$ 时，对于小 V, 在 $\mathrm{Re}\, \boldsymbol{L_0}(\omega)$ 中的单个的谷变成一个小峰，并且在 $\omega \approx \pm U/2$ 形成两个谷, 表明随着温度的降低热激发被抑制。这个两个谷的图像可以从 $V = 0$ 时的极限情况

来理解，在 $V=0$ 时杂化关联具有解析形式，

$$L_{\mathbf{0}}(\omega)=\frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k},\alpha=\pm}\frac{[f(\alpha U/2)-f(\epsilon_{\mathbf{k}})](\epsilon_{\mathbf{k}}-\alpha U/2)}{(\omega+\mathrm{i}\,\eta)^2-(\epsilon_{\mathbf{k}}-\alpha U/2)^2}, \tag{3.5}$$

其中 $f(x)$ 为费米分布，$\eta=0^+$ 为无穷小截断。求和 $\mathbf{k}$ 可以化为对态密度的积分，对于半带宽为 D 的平带而言，在零温极限下，我们可以得到，

$$L_{\mathbf{0}}(\omega)=D^{-1}\ln\frac{(\omega+\mathrm{i}\,\eta)^2-(U/2)^2}{(\omega+\mathrm{i}\,\eta)^2-(D+U/2)^2}, \tag{3.6}$$

表明在 $\omega=\pm U/2$ 附近存在极小值以及在 $\omega=\pm(D+U/2)$ 附近存在极大值。而对于 V 比较大的时候, 又重新恢复到单个谷的图像。在 $T=0.2$ 的时候，两个谷的图像更加明显，相应的 $\mathrm{Im}\,L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 的低能部分的斜率基本为 0，表明在低温的时候热激发的消失。然后对于 V 更大的情况，$\mathrm{Re}\,L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 在 $\omega=0$ 附近出现一个小的凹陷，同时其虚部的在 $|\omega|\approx 0.2$ 的能量窗口内表现出很大的斜率，在这之上斜率存在一个平台。这个大的斜率表明了 c 电子与 f 电子之间的耦合所导致的低能的量子杂化涨落。类似的图像也可以在 $T=0.05$，$V=0.5$ 时看到，而在 V 更大的时候这个实部凹陷变成一个光滑的最大值，同时虚部的斜率被抑制。

$L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 的不同的特征表明在周期性 Anderson 模型中存在 4 个不同的区域，其特征如图 3.2(a)(b) 所示，I，II 区域主要是解耦合的 c 电子与 f 电子的背景贡献。对于区域 I，热激发的贡献非常明显，以至于 $L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 的实部只有一个谷，虚部的低能斜率为一个有限值；而在区域 II，热激发被抑制，$L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 的实部在 $\omega=\pm U/2$ 附近出现两个谷，同时虚部的低能斜率减小。区域 II 的图像对应于 f 电子与 c 电子解耦合的轨道选择的 Mott 物理[92,93]，如图 3.2(c) 所示，f 电子的局域态密度主要为被带隙分开的上下 Hubbard 带；而在区域 I 中，上下 Hubbard 带中间还存在一些热激发的态。

与 I 和 II 不同的区域为存在杂化效应的区域，可以定义两种杂化的区域。在区域 III 中，$\mathrm{Re}\,L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 在 $\omega=0$ 附近出现小的凹陷，$\mathrm{Im}\,L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 中大的低能斜率表明了量子杂化涨落的影响。而在区域 IV 中，这些图像特征再一次被抑制，表明了系统过渡到不同的相，也就是 Kondo 绝缘体，其中的杂化能隙结构在最近的 DMRG 计算中也得到验证[94]。平均场下杂化关联函数可以解析得到：

$$L_{\mathbf{0}}(\omega)=\frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f(E_{\mathbf{k}-})-f(E_{\mathbf{k}+})}{(\omega+\mathrm{i}\,\eta)^2-\Delta_{\mathbf{k}}^2}\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{\Delta_{\mathbf{k}}}, \tag{3.7}$$

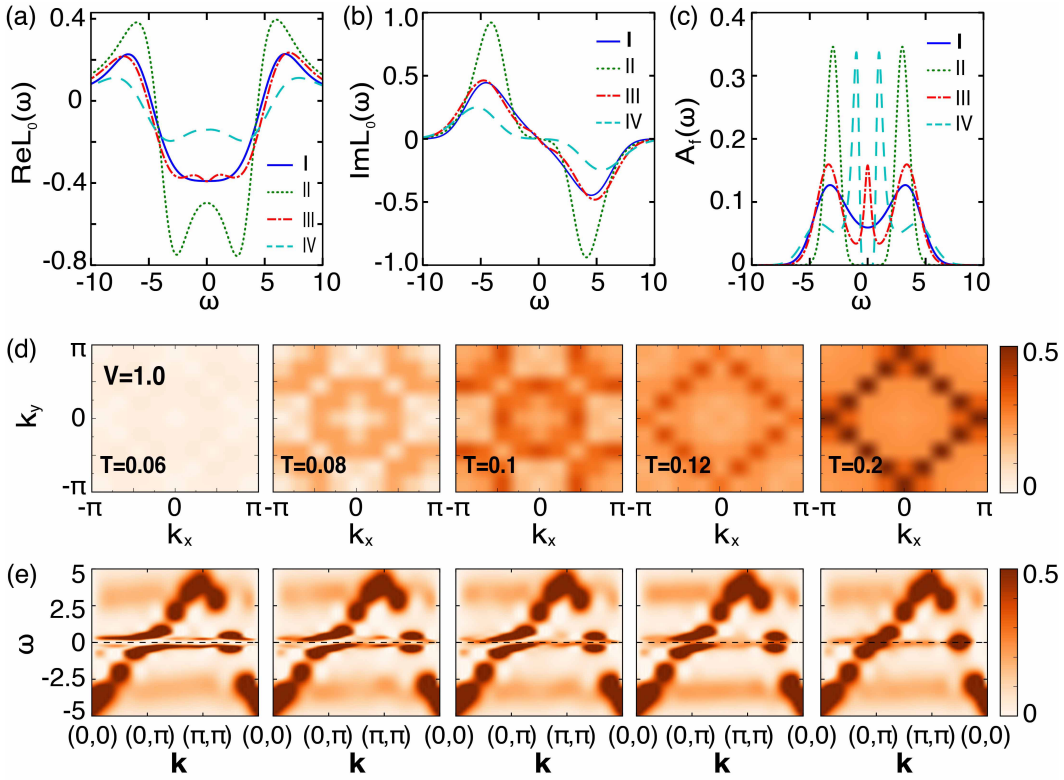

图 3.2 (a)、(b) 对比杂化关联函数 $L_0(\omega)$ 在不同区域内的不同行为特征。(c) f 电子的局域谱函数。不同的区域的参数为，I: $T=2.0, V=0.5$；II: $T=0.6, V=0.25$；III：$T=0.2, V=1.2$; IV：$T=0.05, V=2.0$ 。(d) $V=1.0$ 时，不同温度下布里渊区内在费米能处的费米子谱强度图。(e) 在所选择路径下的色散关系。

Figure 3.2 (a) (b) The different characteristic features of the hybridization correlation function $L_0(\omega)$ in four different regimes. (c) The local density of states of f electron. The parameters are $T=2.0, V=0.5$ for regime I, $T=0.6, V=0.25$ for regime II; $T=0.2, V=1.2$ for regime III; and $T=0.05, V=2.0$ for regime IV. (d) The intensity plots of the fermionic spectral function at Fermi level in the Brillouin zone at different temperature with $V=1.0$. (e) The corresponding dispersion for a given path in the Brillouin zone.

其中 $E_{\mathbf{k}\pm}=(\epsilon_{\mathbf{k}}\pm\Delta_{\mathbf{k}})/2$ 表示两个不同的杂化带，$\Delta_{\mathbf{k}}=\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2+\Delta_0^2}$ 为直接带隙，Δ_0 为等效的杂化强度。因此 Re $L_{\mathbf{0}}(\omega)$ 在 $\omega=\pm\Delta_0$ 附近存在两个极小值。因为对于所有的 $\mathbf{k}$ 均有 $\Delta_{\mathbf{k}}\geq\Delta_0$，于是 Im $L_{\mathbf{0}}(\omega)\propto\sum_{\mathbf{k},\alpha=\pm}\alpha\delta(\omega+\alpha\Delta_{\mathbf{k}})\epsilon_{\mathbf{k}}^2/\Delta_{\mathbf{k}}^2$ 在 $|\omega|<\Delta_0$ 存在能隙。很显然，由于杂化涨落的存在，虚部的低能斜率很大，这个公式在区域 III 失效。这也反应到 f 电子的谱函数上，如图 3.2(c) 所示。不同于区域 IV 中出现的能隙，在区域 III 中 $\omega=0$ 的附近出现了无能隙的 precursor 态，这是平均场所没有得到的；在区域 IV，两个低能部分的尖峰可以理解为在 $E_{\mathbf{k}\pm}$ 中的能带杂化。在图3.2(d) 中展示了 $V=1.0$ 时总的费米子谱强度随着温度的变化情况。我们可以看到从轨道选择的 Mott 区域到 Kondo 绝缘态的过渡，在轨道选择 Mott 区域可以看到两个 Hubbard 带以及小的导带电子费米面，而在 Kondo 绝缘

体区域杂化能隙完全打开，在整个布里渊区都没有明显的谱权重。在这两个区域之间还存在一个过渡区域 III，在这个区域 $\omega = 0$ 处存在有限的谱权重，但表现为不同的图像模式。在图3.2(e) 可以看到在区域 III 中已经出现轻微的能带弯曲，但是带隙只是部分打开导致在费米能附近存在有限的权重以及拓宽的峰。这与 ARPES 实验的测量结果和泵浦-探测实验的两阶段杂化图像的设想是吻合的，同时在光电导的实验中能带弯曲也是直接带隙打开的迹象[95]。

3.3.2 局域与非局域贡献

为了理解杂化涨落是如何引起 f 电子在低温时的相干现象，我们比较了 Re $L_0(\omega)$ 的局域与非局域贡献，如图 3.3(a) 所示。

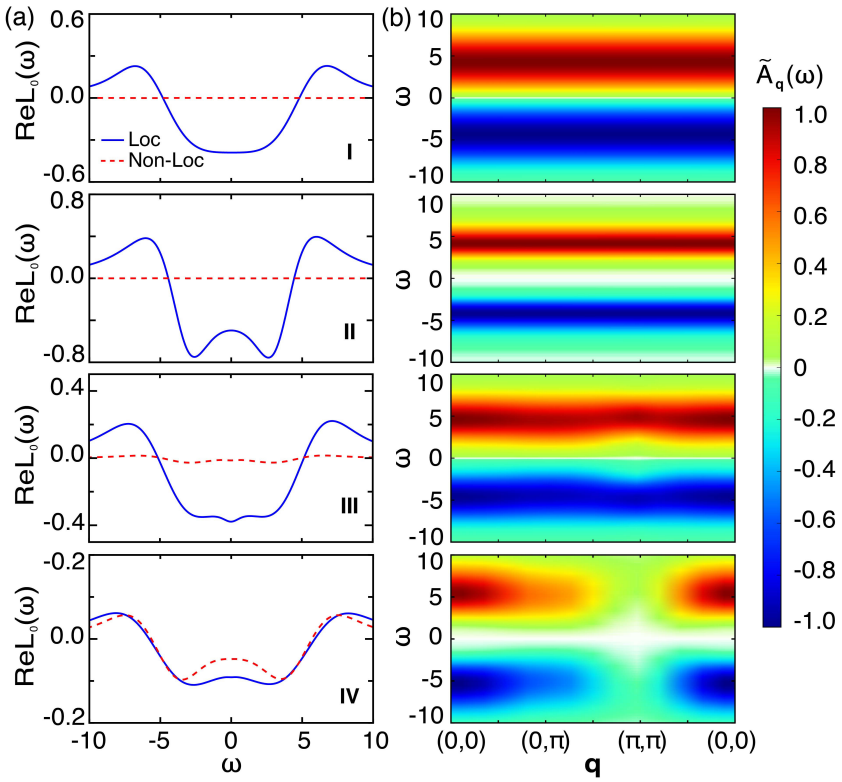

图 3.3 (a) 在不同的区域，杂化关联函数实部 Re $L_0(\omega)$ 的局域和非局域项的比较。在区域 III 中，非局域项才开始有贡献，而在区域 IV 中，非局域项达到与局域项相比拟的程度。(b) 在给定路径上，杂化关联谱函数的强度图，其在 (π, π) 处有明显的变化。参数与图3.2相同。

Figure 3.3 (a) Comparison the local and nonlocal terms of the real part of hybridization correlation function Re $L_0(\omega)$ **and it shows the onset of the nonlocal contribution in regime III and development in regime IV. (b) Intensity plots of the normalized hybridization spectral function, showing the development of the hybridization correlations at** (π, π)**. The parameters are the same as Fig 3.2.**

在区域 I 和 II 中非局域的贡献是可以忽略不计的，直到进入区域 III，非局

域的贡献才开始显现出来，甚至在区域 IV 中达到可以与局域部分相比拟的程度。尽管在区域 III 中能带弯曲已经开始出现，而晶格相干只有在存在足够强的格点间的杂化关联的时候才能出现。而值得注意的是，在非局域的贡献中，只有最近邻的项是最主要的，因此 Kondo 绝缘体应该被看作一个短程关联的绝缘体而不是平均场图像下的简单的能带绝缘体。这个短程的关联与以前的掺杂的 Kondo 晶格模型的计算和 NMR 观测结果一致[89,96]。进一步观察其在动量空间的情况，图3.3(b) 展示了归一化杂化关联谱的在第一布里渊区 $(0,0)-(0,\pi)-(\pi,\pi)-(0,0)$ 路径下的动量依赖。在区域 I,II 中，谱函数只表现出基本的 Hubbard 带的特征，区域 III 中，在 (π,π) 处开始出现变化，而最终在区域 IV 中破坏 Mott 的图像，这表明了非局域杂化关联与局域的 Mott 物理之间的竞争，而主要的变化发生在 (π,π) 处，表明可能存在杂化涨落与磁涨落之间的相互作用[81]。

3.3.3　相图

综合所有的计算结果，我们可以只通过杂化关联函数的分析得到一个相图，如图3.4所示，其中，点和划线标志着从 $\mathrm{Re}\, \boldsymbol{L_0}(\omega)$ 特征得到的相边界，颜色代表着虚部斜率的大小，$K = \mathrm{d}\,\mathrm{Im}\, \boldsymbol{L_0}(\omega)/\mathrm{d}\omega\big|_{\omega=0}$。相图中显示出 4 个明显不同的区域，在 $V = 1.0$ 时与右侧 K 的非单调行为中所划分的结果一致。类似于 slave-boson 方法得到的结果，在低温时有限的 K 标志着无能隙的连续杂化激发，而在 Mott 和 Kondo 绝缘态区域，K 近似为 0，与平均场近似的结果一致。区域 III 连接了非杂化的 Mott 态和完全杂化的 Kondo 绝缘态，标志着 f 电子从局域到巡游的过渡。以前的解析计算认为，零温的局域巡游转变可以认为是轨道选择的 Mott 相变[97,98]，这与我们的结果一致，区域 III 可以认为是量子临界点之上的过渡区域。需要注意的是在 Kondo 绝缘态之前出现的一个预备的区域在以前的计算中也得到过，但没有通过杂化关联来讨论分析[32,99,100]。同时最近的研究表明在 Kondo 绝缘体中非厄米物理会产生很多新奇的现象[101–103]。在 Kondo 绝缘相的高温边缘附近存在所谓的例外点（exceptional point）[103]。在我们的计算中，如果将方程 (3.7) 做替换，$\eta \to \Gamma_k$，我们可以得到有限的斜率 $K \propto -\sum_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^2/\Delta_{\mathbf{k}}(\Gamma_{\mathbf{k}}^2+\Delta_{\mathbf{k}}^2)^2$，同时在 $\Gamma_{\mathbf{k}} \to 0$ 或者 ∞ 的时候，K 趋近于 0。因此在区域 III 中，有限的 K 可能与杂化或者费米型激发的有限的耗散和寿命相关，可能会引起一些新奇的非厄米的物理。

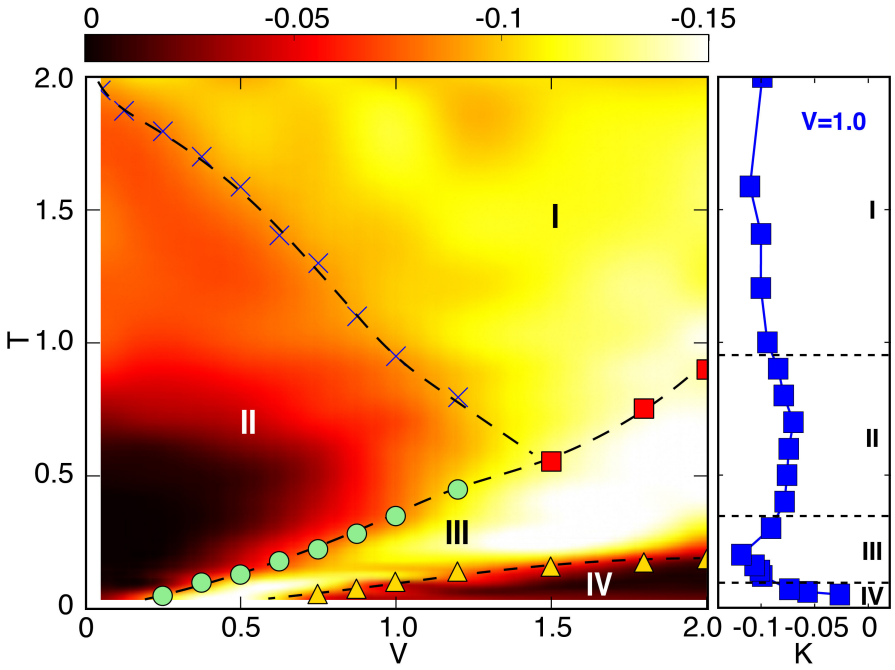

图 3.4 由杂化关联函数的行为 $L_0(\omega)$ 而确定的相图。背景颜色反映了虚部的低频斜率的大小。虚线和点表示由实部行为所确定的各个区域的边界。右侧为当 $V = 1.0$ 时，虚部低频斜率在不同温度下的非单调变化行为。

Figure 3.4 A tentative phase diagram obtained solely based on the behaviors of hybridization correlation function $L_0(\omega)$. The background color reflects the low-energy slope K of $\mathrm{Im}L_0(\omega)$. The marks are the boundary estimated from its real part. The right panel shows the non-monotonic temperature dependence of the K at $V = 1.0$.

3.4 本章小结

我们利用 DQMC 方法研究了半满周期性 Anderson 模型的杂化涨落。这使我们能够得到超越平均场方法的信息，并仅基于杂化涨落谱函数构建了相应的相图。我们发现了从非杂化的 Mott 态到完全杂化的 Kondo 绝缘态之间存在一个过渡区域，在这个过渡区域中存在低能的杂化涨落，传导电子在费米波矢附近发生能带弯曲并打开直接带隙，这与在光电导实验在远高于相干温度的观测结果一致。当格点间杂化的增强到一定程度，在更低的温度下才能产生 f 电子间相干效应。这证实了基于最近的 ARPES 和超快激光泵浦-探测实验提出的两阶段杂化图像。

通过对杂化关联的研究为 ARPES、超快激光泵浦-探测等实验的测量结果的高温特性提供了一种统一的解释。这个工作是通过数值方法研究杂化动力学来解释重费米子系统中新奇性质的开端，而扩展到量子临界态或金属相以及非半满占据情况还需要更多的研究，以便于与以后实验结论和理论缝隙进行全面比

较。而类似的两阶段过程是否在更多的体系中存在，以及如何去刻画都是值得探究的问题。

第 4 章　Mott 与 Kondo 晶格物理的能标对应

在本章中，我们研究了 Mott 物理与 Kondo 晶格物理中的能标对应，同时构建了具有两个特征温度的相图。表明在强关联晶格系统中存在一个普适的两阶段过程，在最终建立长程的晶格相干之前，电子存在一个部分退局域前兆阶段。

4.1　研究背景

在强关联系统中，kink 意味着能带色散中的斜率的突变，它通常被认为是准粒子与玻色型集体激发相耦合的结果。在铜氧化物中，出现在 30-90 meV 的 kink 归因于自旋涨落或者声子[20,21,104–107]。与这种玻色型的 kink 不同的是，在纯的电子系统中发现完全由电子间相互作用而引起的 kink[108]。如图4.1所示，在动力学平均场计算得到的色散关系中发现了 kink 的存在。在 $|\omega| < \omega^*$，$|\omega| > \omega^*$ 两个不同的区域里，等效色散关系有不同的重整化因子，对应于自能实部两个斜率不同的近似线型的能量区域，ω^* 即为 kink 能标。在动力学平均场的框架下研究 Hubbard 模型发现了这种 kink[108,109]，同时可以推广到更复杂的模型中[110–116]，这种 kink 或许可以解释在铜氧化物以及一些其他的过渡金属氧化物中的高能 kink[117–124]。

理论上，这种电子的 kink 被认为是 Mott 物理中的一个重要能标，标记了费米液体的边界[108]。kink 能标 ω^* 意味着明确的 Landau 准粒子的低能边界，给出费米液体理论适用的一个范围。另一个更高的能标 Ω 则是区分多体共振态和高能 Hubbard 带的能标。ω^* 和 Ω 定义了 Hubbard 模型中的主要能标，它们的真实物理来源引起了人们的关注。Raas 认为这个 kink 能标来源于内在的自旋涨落的集体激发[125]，而 Held 将它与一个等效的 Kondo 能标联系起来[126]。对这些能标的理解能够加深我们对多体物理的认识，然而其重要性和潜在的应用还没有被充分意识到。

在本章中，我们通过系统的数值研究建立了 Hubbard 模型与周期性 Anderson 模型中两个能标的对应以及在强关联电子系统中的应用。这种能标的对应主要源于在 Hubbard 模型中的两个能标与重整化因子 Z 之间存在 $\omega^* \propto Z$ 和 $\Omega \propto Z^{1/2}$ 的关系[108,127]。而周期性 Anderson 模型在平均场近似下存在着两个能标，也就

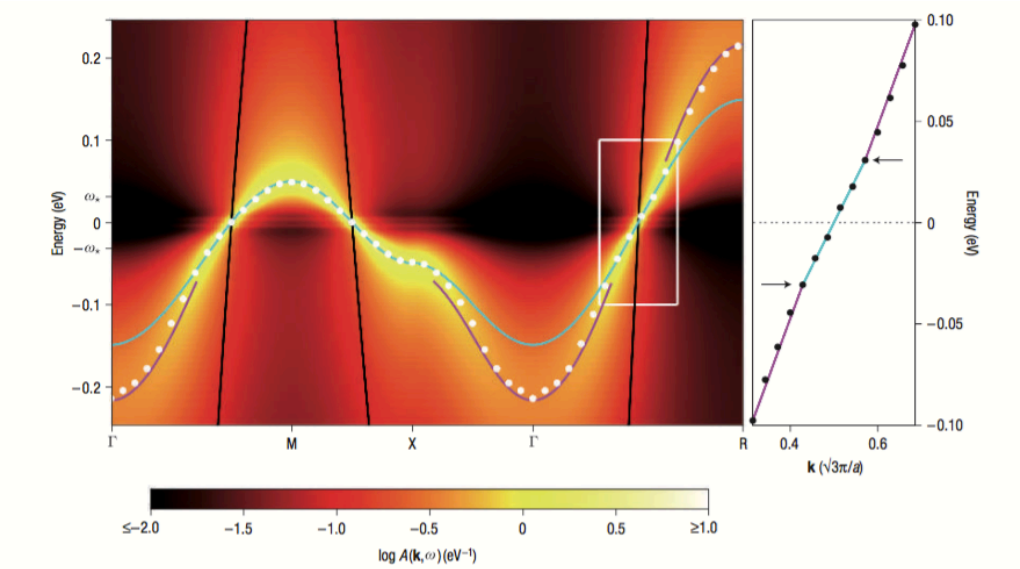

图 4.1 强关联系统的色散关系 $E_{\mathbf{k}}$ 中出现的 kink。正方晶格上 Hubbard 模型通过动力学平均场计算的得到的能谱 $A(\mathbf{k},\omega)$ 强度图。白色圆点为等效的色散关系，在靠近费米面的地方它遵循重整化能带关系，$E_{\mathbf{k}} = Z_{\mathrm{FL}} E_{\mathbf{k}}$（蓝色实线）。对于 $|\omega| > \omega^*$ 的情况，色散关系的重整化因子变为 Z_{cp}。ω^* 为 kink 能标[108]。

Figure 4.1 Kinks in the dispersion, $E_{\mathbf{k}}$, for the strongly correlated system. The intensity plot represents the spectral function $A(\mathbf{k},\omega)$ for Hubbard on the cubic lattice obtained by DMFT. The white circles indicate the effective dispersion. It follows the renormalized band structure, $E_{\mathbf{k}} = Z_{\mathrm{FL}} E_{\mathbf{k}}$(blue line) close the Fermi energy. For $|\omega| > \omega^*$, the dispersion has the same shape but with a different renormalization factor Z_{cp}. ω^* is the kink energy[108].

是间接带隙（Δ_{ind}）和直接带隙（Δ_{dir}）与等效杂化强度 $\tilde{V}$ 之间有类似的比例关系：$\Delta_{\mathrm{ind}} \propto \tilde{V}^2$，$\Delta_{\mathrm{dir}} \propto \tilde{V}$。杂化能隙有着明确的物理意义，这种相似性可能对 Hubbard 模型的物理理解提供一些新的观点或者揭示两个模型之间的一些共通的物理图像。通过对 Hubbard 模型和周期性 Anderson 模型研究表明 Mott 物理与 Kondo 晶格物理之间可能存在一些密切的联系[92]，在 Kondo 晶格的物理被认为是一种轨道选择 Mott 转变[128]，而铜氧化物中的 Mott 物理是 Kondo-Heisenberg 模型的低能映射[129]。在最近发现的镍酸盐超导体中，似乎两者都存在并且共同决定了体系的基态和低能激发[130]。这样的能标对应揭示了准粒子的产生和相干之间更深的普适的物理图像。两个能标的区分或许表明了准粒子的动力学中建立长程相干的两阶段过程，这是强关联晶格系统中的一个本质的普适性质，提供了强关联系统中用来区分完全相干态、局域态和一个中间过渡态的特征能量。

4.2　模型和方法

我们主要研究 Hubbard 模型和周期性 Anderson 模型，它们都由两个部分构成：

$$H = H_K + H_U, \tag{4.1}$$

其中，$H_U = U\sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right)$ 为势能部分，U 为库仑相互作用强度，$n_{i\sigma}$ 为局域 f 电子的粒子数算符。有两种方式让 f 电子退局域：在 Hubbard 模型中，引入在近邻格点间的直接的跃迁，$H_K = \sum_{\mathbf{k}\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}} f^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}$，其中 $f^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(f_{\mathbf{k}\sigma})$ 为 f 电子的产生（消灭）算符；在周期性 Anderson 模型中，f 电子与一个额外的导带电子耦合，$H_K = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + V(\sum_{i\sigma} f^\dagger_{i\sigma} f_{i\sigma} + h.c.)$，其中 $c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}(c_{\mathbf{k}\sigma})$ 为导带电子的产生（消灭）算符，V 为杂化强度。简单起见，我们主要关注于单带半满 Hubbard 模型的顺磁态，并在动力学平均场[47,55,57,131] 的框架下利用 NRG[35,44] 为杂质求解器进行计算。在 NRG 中，f 电子的自能通过

$$\Sigma(\omega) = U F(\omega)/G(\omega), \tag{4.2}$$

进行计算，其中 $G(\omega) = \langle\langle f_{i\sigma}; f^\dagger_{i\sigma}\rangle\rangle_\omega$，$F(\omega) = \langle\langle f_{i\sigma}(n_{i\bar{\sigma}} - 1/2); f^\dagger_{i\sigma}\rangle\rangle_\omega$ [132]。在 DMFT 自洽过程中[2,133]，对于 Hubbard 模型，

$$G(\omega) = \int d\epsilon \frac{\rho_0(\epsilon)}{\omega - \epsilon - \Sigma(\omega)}, \tag{4.3}$$

对于周期性 Anderson 模型，

$$G(\omega) = \int d\epsilon \frac{\rho_0(\epsilon)}{\omega - V^2/(\omega - \epsilon + i\eta) - \Sigma(\omega)}, \tag{4.4}$$

其中 $\rho_0(\epsilon) = e^{-(\epsilon/t)^2}/(\sqrt{\pi}t)$ 为无穷维超立方晶格的无相互作用的电子态密度，$t = 1$ 为能量单位。

4.3　计算结果

4.3.1　能标定义

图4.2展示了两个模型中通过 f 电子局域态密度 $\rho(\omega) = -\mathrm{Im}G(\omega)/\pi$，自能的实部 $\mathrm{Re}\Sigma(\omega)$ 以及相应的斜率 $\mathrm{Re}\Sigma'(\omega)$ 和格林函数的实部 $\mathrm{Re}G(\omega)$ 来定义两个能标。对于 Hubbard 模型来说，f 电子态密度为一个三峰结构，包括高能区的两个 Hubbard 峰以及在费米面附近的准粒子峰。这里大能标 Ω 由 $\mathrm{Re}\Sigma'(\omega)$ 的极

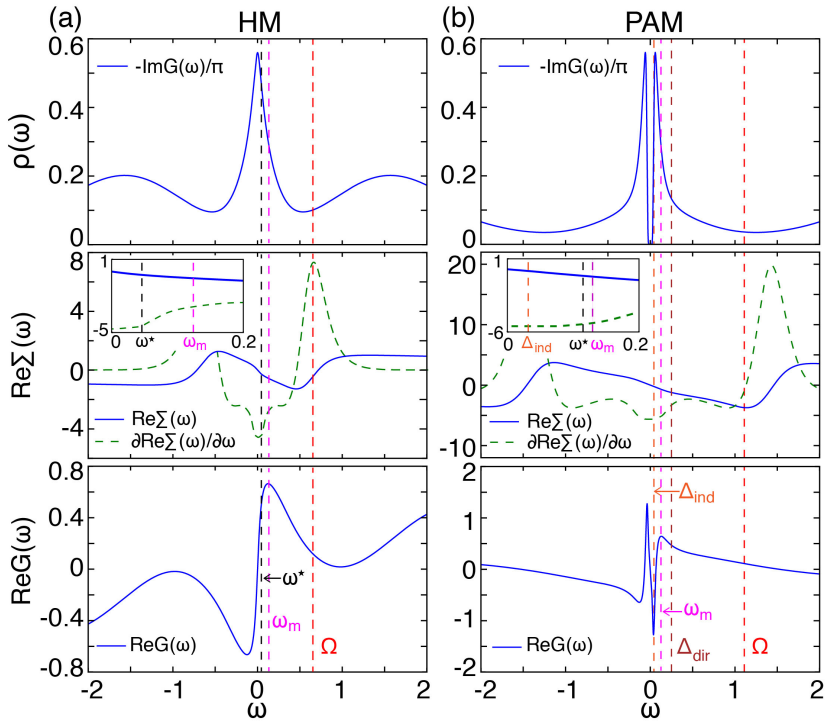

图 **4.2** 来源于 f 电子谱函数 ($\rho(\omega) = -\mathrm{Im}G(\omega)/\pi$)、自能实部 ($\mathrm{Re}\Sigma(\omega)$) 及其斜率 ($\mathrm{Re}\Sigma'(\omega)$)、格林函数实部 ($\mathrm{Re}G(\omega)$) 的各种能标的展示。**(a) Hubbard** 模型，参数 $U = 3$。**(b)** 周期性 **Anderson** 模型，参数 $U = 5.6$，$V^2 = 0.4$。ω^* 由自能实部上的 **kink** 位置确定，ω_m 由 $\mathrm{Re}G(\omega)$ 的极大值点确定，在 **Hubbard** 模型中 Ω 由 $\mathrm{Re}\Sigma'(\omega)$ 的极大值确定。在周期性 **Anderson** 模型中，Δ_{ind} 由谱函数上的能隙确定，Δ_{dir} 的确定可以从图**4.4**更清晰看到。插图为在 $\omega = 0$ 附近的放大图。

Figure 4.2 Different energy scales are identified from the f **electron density of states** $\rho(\omega) = -\mathrm{Im}G(\omega)/\pi$**, the real part of the** f **electron self-energy** $\mathrm{Re}\Sigma(\omega)$ **and its slope** $\mathrm{Re}\Sigma'(\omega)$**, the real part of the Green function,** $\mathrm{Re}G(\omega)$**. (a) HM with** $U = 3$**. (b) PAM with** $U = 5.6$ **and** $V^2 = 0.4$**.** ω^* **is defined from the kink in** $\mathrm{Re}\Sigma(\omega)$**,** ω_{m} **is defined from the maximum of** $\mathrm{Re}G(\omega)$**, and for the HM** Ω **is from the maximum of** $\mathrm{Re}\Sigma'(\omega)$**. For the PAM,** Δ_{ind} **is defined from the gap in the density of states and** Δ_{dir} **is from the dispersion shown in Fig. 4.4. The insets are the enlarged plots of** ω^***,** ω_{m}**, and** Δ_{ind} **around** $\omega = 0$**.**

大值点来定义，而在以前的工作中 Ω 是通过 $\mathrm{Re}\Sigma(\omega)$ 的极大值来定义[108]。这个能标粗略地区分了态密度上的 Hubbard 峰和准粒子峰。低能能标 ω^* 由自能实部斜率的变化来定义，它限制了准粒子激发的低能区域。ω_m 由格林函数的实部 $\mathrm{Re}G(\omega)$ 的极大值点来确定，同时 $\omega^* \approx (\sqrt{2}-1)\omega_m$ 表明他们有同样的物理起源[108]。ω_s 由局域自旋磁化率来确定，如图4.6所示。这些能标可以通过重整化因子 $Z = 1 - \mathrm{Re}\Sigma'(0)$ 联系起来，如图4.3(a) 所示，$\omega^* \propto \omega_m \propto Z$，而 $\Omega \propto Z^{1/2}$。因此，ω^* 和 Ω 表明了两个相关的能标，它们不同的定义来源于一个过渡的基本物理图像。

相应地，图4.2(b) 中展示了周期性 Anderson 模型中的能标。间接杂化能隙 Δ_{ind} 由态密度上的能隙确定，同时在格林函数实部 $\text{Re}G(\omega)$ 上出现一个新增的极小值。直接带隙 Δ_{dir} 可以从图4.4中的谱函数 $A_{\mathbf{k}}(\omega) = -\pi^{-1}\text{Im}[\omega - \Sigma(\omega) - \frac{V^2}{\omega-\epsilon_{\mathbf{k}}+i\eta}]^{-1}$ 更明显的看到，在图4.4中可以看到两条清晰的杂化带，间接带隙由上能带底与下能带顶的能量差来决定。尽管此时系统表现为一个近藤绝缘体，自能在 $\omega < \Delta_{\text{ind}}$ 时却表现为费米液体的行为[133]，反映了 Anderson 晶格体系中的完全相干态的建立[42,134]。直接带隙 Δ_{dir} 则为两条杂化带相同 $\mathbf{k}$ 点能量差的最小值，在 $\omega < \Delta_{\text{dir}}$ 主要为巡游的 f 电子。相应的能标 ω^* 以及 ω_m 可以类似于 Hubbard 模型中的方法定义，我们发现 $\omega^* \propto \omega_m \propto \Delta_{\text{ind}}$。$\text{Re}\Sigma'(\omega)$ 的极大值的位置随 U 变化很小，不再作为区分巡游和局域的边界。在周期性 Anderson 模型中，我们发现大能标 Ω 可以用杂化带偏离最初的无相互作用导带的位置来定义。Ω 和 Δ_{dir} 反应了杂化（巡游）和非杂化（局域）的区域。

4.3.2　标度行为与物理图像

图4.3展示了两个模型中各个能标随着重整化因子 Z 的变化情况，结果表明在一个很宽的范围内有 $\omega^* \propto \omega_{\text{m}} \propto \Delta_{\text{ind}} \propto Z$ 以及 $\Omega \propto \Delta_{\text{dir}} \propto Z^{1/2}$。这将 ω^*, Ω 与 Δ_{ind}, Δ_{dir} 联系起来并且意味着它们具有相似的物理。不同于难以测量的 ω^* 和 Ω，间接和直接带隙在实验中可以直接测量并具有明确的物理意义。周期性 Anderson 模型中，它们的比例关系可以直接从格林函数，$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \left[\omega - \Sigma(\omega) - \frac{V^2}{\omega-\epsilon_{\mathbf{k}}+i\eta}\right]^{-1}$ 中得到。作最低阶近似 $\text{Re}\Sigma(\omega) \approx (1 - Z^{-1})\omega$，奇点从 $Z^{-1}\omega - \frac{V^2}{\omega-\epsilon_{\mathbf{k}}} = 0$ 确定。直接带隙由 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 处的两个奇点的能量差决定，可以得到 $\Delta_{\text{dir}} = Z^{1/2}V$，而间接带隙由在 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \pm D$ 处的能量差决定，有 $\Delta_{\text{ind}} = ZV^2/D$。杂化带偏离导带可以通过选择一个小的偏移量 $\delta = (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})/\epsilon_{\mathbf{k}} \approx ZV^2/\omega^2$ 确定，可以得到 $\Omega \approx Z^{1/2}V/\delta^2$，相应的在这个 f 电子的谱权重也在 $Z\delta$ 这个量级。这些能标在 $V = 0$ 的时候消失，它们的存在反映了格点上的 f 电子由于与导带电子耦合而引起的退局域。Ω 标志着主要的非局域的 f 电子区域，而 ω^* 进一步表明了长程相干的建立。

类似的分析可以帮助理解 Hubbard 模型中的 ω^* 和 Ω。图4.4展示了 Hubbard 模型的谱函数 $A_{\mathbf{k}}(\omega) = -\pi^{-1}\text{Im}[\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\omega)]^{-1}$。$\omega^*$ 标志了 Laudau 准粒子的边界，在 ω^* 之上色散上表现出一个不同的重整化因子；Ω 区分了低能多体态和高能非相干态，在 Ω 之上 f 电子表现为局域态。ω^* 和 Ω 都是 $\text{Re}\Sigma'(\omega)$ 中特别的瀑布结构的表现，如图4.2(a) 所示，在 Ω 处有一个最大值而降低到 ω^* 处达到一个

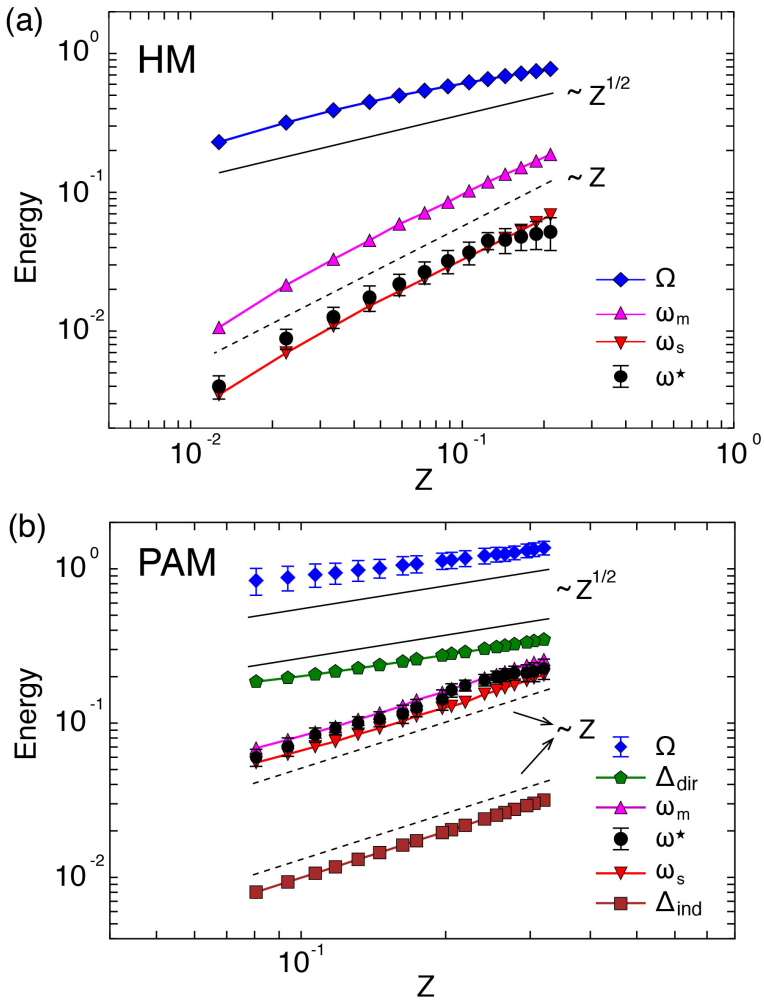

图 4.3 不同的能标与重整化因子 Z 之间的关系。(a) 为 Hubbard 模型。(b) 为周期性 Anderson 模型。在周期性 Anderson 模型中，$V^2 = 0.4$。

Figure 4.3 The scaling relation between different energy scales and the renormalization factor Z. (a) for the HM and (b) the PAM with different U. For the PAM, $V^2 = 0.4$.

平台，并最终达到在 ω^* 和 ω_{m} 之下的谷底。有趣的是，Ω 粗略地落在色散上的瀑布结构中，连接了准粒子的 Hubbard 带[135,136]。这提出一个关于两者之间关系的问题。我们注意到，这个瀑布结构是随着格林函数的奇点变化而变化，这只能发生在 $\omega - \mathrm{Re}\Sigma(\omega)$ 的拐点附近。这意味着 $\mathrm{Re}\Sigma''(\Omega) = 0$ 或者 $\mathrm{Re}\Sigma'(\Omega)$ 为极大值，因此这里定义的 Ω 的确与 Hubbard 模型中的瀑布结构有关。我们得出结论，两个能标对应着色散上的两个图像：ω^* 对应着 kink，Ω 对应着瀑布结构同时反映了低能相干区域与高能局域区域的分界。$\Omega \propto Z^{1/2}$ 类似于其在周期性 Anderson 模型中的情况。

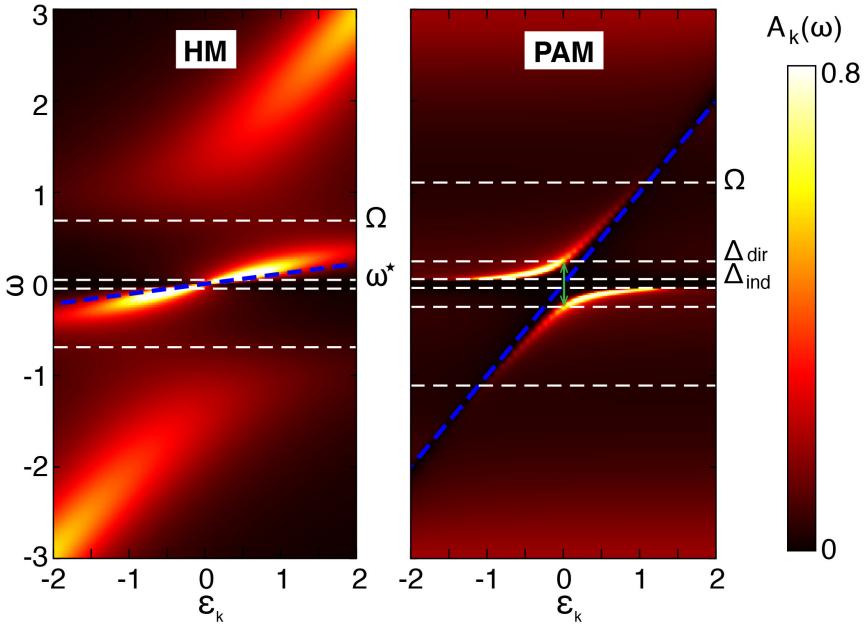

图 4.4 Hubbard 模型和周期性 Anderson 模型的能谱强度图以及不同的能标。左侧为 Hubbard 模型，右侧为周期性 Anderson 模型。背景颜色反映 f 电子的普权重 $A_{\mathrm{k}}(\omega)$。图中蓝色虚线在 Hubbard 模型图中为 $Z\epsilon_{\mathrm{k}}$，而在周期性 Anderson 模型图中为 ϵ_{k}。参数与图4.2相同。

Figure 4.4 The intensity plots of the resolved spectral functions for the HM (left panel) and the PAM (right panel) with the lines locating different energy scales. The background colors reflect the f electron spectral weight $A_{\mathrm{k}}(\omega)$. For the HM, the blue dashed lines shows the renormalized dispersion $Z\epsilon_{\mathrm{k}}$ and for the PAM it denotes ϵ_{k}.

进一步考虑到周期性 Anderson 模型中的 Δ_{ind} 与自旋屏蔽有关，$\omega^* \propto \Delta_{\mathrm{ind}} \propto T_K$，其中 T_K 为晶格近藤温度[95,137]，那么 ω^* 可能具有类似的物理意义。可以从局域磁化率来看自旋屏蔽的效果，其定义如下：

$$\chi_s(\omega) = \langle\langle S_i^z; S_i^z \rangle\rangle_\omega, \tag{4.5}$$

其中 $S_i^z = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$[138]。图4.5展示了 Hubbard 模型与周期性 Anderson 模型的局域自旋磁化率的虚部，参数与图4.2中一致。它们都在 ω_s 处有一个极大值，插图中可以看到 ω_s 与 Z 满足线性关系与 ω^* 和 Δ_{ind} 一致。事实上，在两个模型中都有这样的线性关系。在 ω_s 以下，局域自旋磁化率由于自旋屏蔽而被抑制，这自然地将 kink 与文献[126] 中所提出的等效的自旋屏蔽能标项联系起来。需要注意的是，ω^* 和 Ω 能标都是晶格模型的性质，在通常的单杂质模型中只存在单杂质的 Kondo 能标。这意味着晶格效应是区分 ω^* 和 Ω 的根本原因，尽管动力学平均场并不包含精确的空间关联。

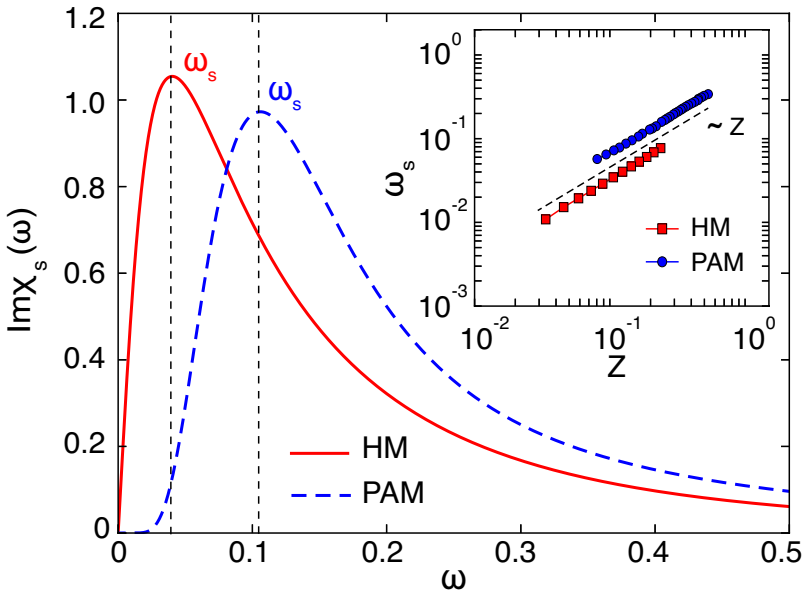

图 4.5 局域自旋磁化率的虚部。对于 Hubbard 模型与周期性 Anderson 模型，在 ω_s 处都出现一个极大值。参数与图4.2一致。插图反映了 ω_s 对于不同的 U 随着 Z 的变化情况。

Figure 4.5 The imaginary part of the local spin susceptibility s shows a maximum at ω_s for both HM and PAM. The parameters are the same as in Fig. 4.2. The inset shows the ω_s as functions of Z for varying U with $V^2 = 0.4$ for the PAM.

4.3.3 相图

因此，这些能标可以分为两类，一类是低能能标 $\omega \propto Z$，另一类是高能能标 $\Omega \propto Z^{1/2}$，这些能标将 f 电子谱权重分成具有不同性质的几个区域。从局域的 f 电子开始，自旋屏蔽和退局域化是一个能量相关的过程，这个过程中存在两个能标。大能标 Ω 是多体共振态最外的边界，它覆盖了所有的退局域的 f 电子的能量范围，而小能标 ω^* 是具有长程关联相干的良好定义的准粒子激发的边界。这是 Hubbard 模型与周期性 Anderson 模型的一个共同的图像，因此我们可以建立一个相图，如图4.6所示。对 $Z > 0$ 时，$\omega^* \propto Z$ 的线表明一个屏蔽的能标并标记着一个良好形成的相干区域的上边界，而 $\Omega \propto Z^{1/2}$ 标志着一个局域 f 电子的非相干区域的下边界。在两者之间，存在一个具有巡游性的 f 电子激发的过渡区域。随着 Z 减少到零，对于 Hubbard 模型系统进入 Mott 绝缘态，对于周期性 Anderson 模型系统进入轨道选择的 Mott 绝缘态，多体相干态被抑制，所有的 f 电子表现为局域磁矩。

这两个能标展示了强关联电子系统中两个相关又不同的图像，在实验上同样有一些可观测的结果。通过降温来查看 f 电子逐渐地退局域化，这两个能标将反

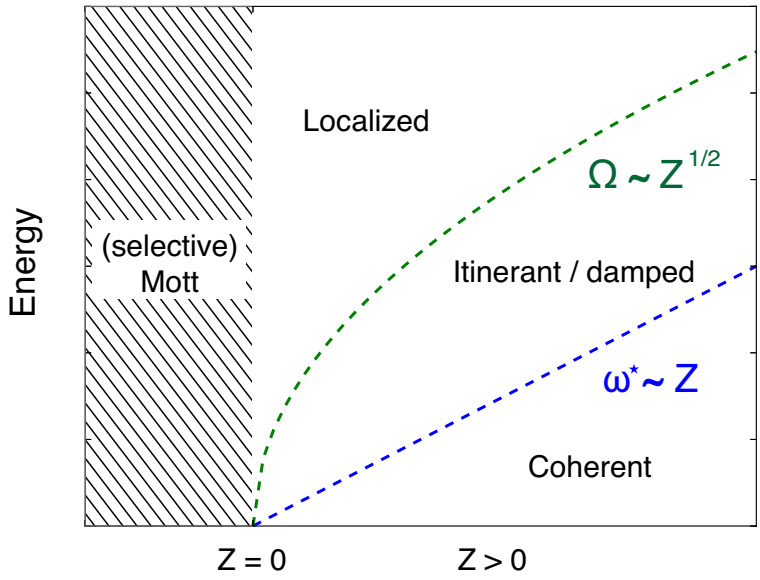

图 4.6 Hubbard 模型与周期性 Anderson 模型在能量—Z 空间的一个暂定相图，展示了关联电子的不同区域。对于 $Z<0$ 的时候，f 电子为完全局域的，在 Hubbard 模型中表现为 Mott 绝缘体而在周期性 Anderson 模型中则为轨道选择的 Mott 绝缘体。

Figure 4.6 A tentative phase diagram of the HM and PAM in the energy-Z space and it shows different regions of correlated electron spectral weights. When Z cross $Z=0$ from the $Z>0$ side, the f electrons become completely localized so that the HM goes into a Mott state and the PAM goes into an orbital-selective Mott state.

映为两个温标，正如最近对 $CeCoIn_5$ 的泵浦-探测实验[42] 中所观察到那样。对于周期性 Anderson 模型的量子蒙特卡罗模拟计算结果也证实了一种两阶段的杂化动力学。在 Hubbard 模型中，这两个能标也表明了两阶段的准粒子激发，一个为良好定义的 Landau 准粒子以及一个为被抑制的巡游准粒子过渡区域[115,116,133]。按照这种思路，我们认为两个能标的存在和分离反映了电子相干性普遍的两阶段发展过程，这是 Mott 系统中关联电子的本征性质。在最终建立长程相干之前，存在一个预备阶段，在该阶段电子表现为部分退局域。

4.4　本章小结

在本章中，我们系统分析了 Hubbard 模型和周期性 Anderson 模型中的能标对应，并揭示了 Mott 物理和 Kondo 晶格物理之间的深层联系。基于两个不同的能标，我们建立相应的相图，低能能标为低能相干态的上边界而高能能标为非相干态的下边界。对于 Hubbard 模型而言，它们对应于色散上的 kink 和瀑布结构。对于周期性 Anderson 模型，它们与间接和直接杂化带隙相关。这两个能标的分

离是晶格模型的固有属性，反映了建立晶格相干性的两阶段过程，意味着这种两阶段过程是强关联晶格系统的普适现象。

第 5 章　Mott 相变的经典对应

本章使用机器学习结合动力学平均场方法，将半满单带的 Hubbard 模型映射到一个等效的只具有简单二体相互作用的经典模型。我们发现 Hubbard 模型中的 Mott 相变，在等效的经典模型中对应于相互作用长度的对数发散。在动力学平均场框架下系统存在金属和绝缘态共存的区域，这可能反映了 Mott 相变中的两阶段过程。

5.1　研究背景

Mott 相变是强关联电子系统中的一个非常重要的现象，不同于能带绝缘体，局域电子间很强的库仑相互作用可以使得非整数占据的系统从金属态变成绝缘态，从而解决了早期经典能带论无法解释一些未填满的过渡金属氧化物表现出绝缘态的问题[1,139]，并为我们理解强关联体系中的新奇性质提供了基础。过去几十年，Mott 相变在理论和实验方面都被广泛的研究[24–27,57,140–145]。

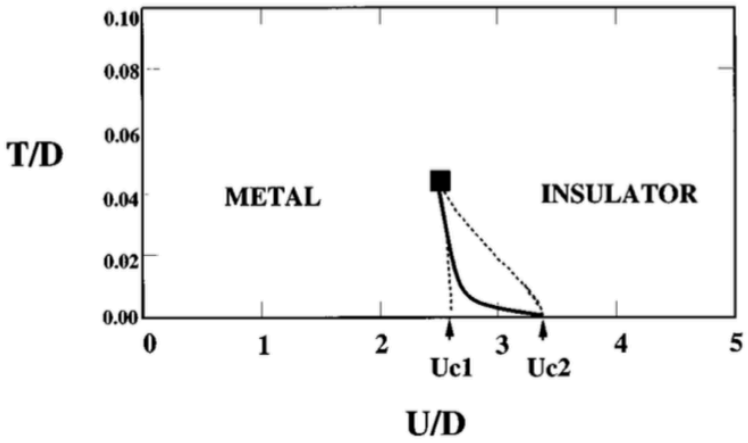

图 5.1 DMFT 框架下得到的半满 Bethe 晶格 Hubbard 模型顺磁相图[47]。

Figure 5.1 The paramagnetic phase diagram obtained by DMFT for half-filled Hubbard model on the Bethe lattice[47].

在动力学平均场（DMFT）框架下的计算结果表明 Mott 相变为一阶相变，从不同的初始态（金属、绝缘）出发，在临界端点之下系统存在金属和绝缘态共存的区域[24,47,57,142–148]。图5.1展示了在 DMFT 框架下得到的半满顺磁 Bethe 晶格的 Hubbard 模型的相图，图中 U_{c1}, U_{c2} 分别表示从绝缘态、金属态出发得到的

Mott 相变的临界相互作用强度 U，临界端点由黑色方框标志。$U_{c1}(T), U_{c2}(T)$ 之间的区域即为金属态和绝缘态的共存区。

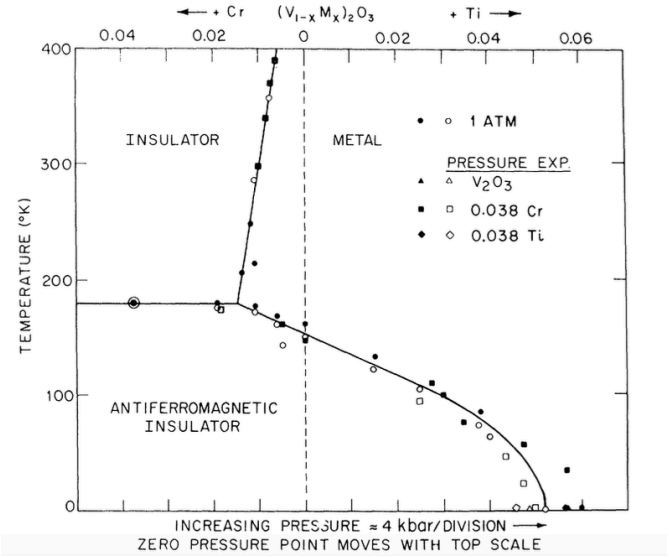

图 5.2 Cr 或者 Ti 掺杂的 V_2O_3 在调制温度、压强和掺杂程度下得到的相图[149]。

Figure 5.2 The phase diagram of V_2O_3 doped with Cr or Ti by changing temperature, pressure and doping level[149].

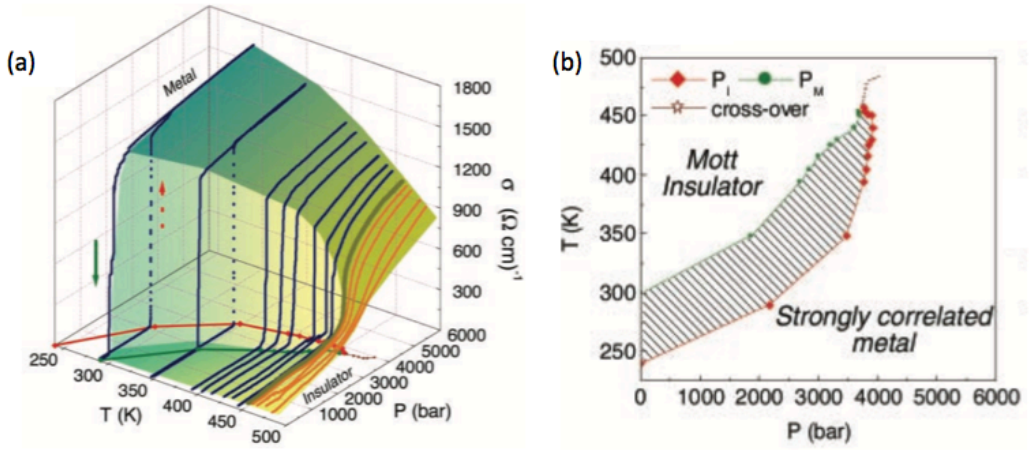

图 5.3 (a) $V_{2-x}Cr_xO_3$ 在不同温度温度下，从不断减少以及增加压强过程中测量的电导率。在 $T = 290\text{K}, 348\text{K}$ 可以看到明显的回滞图像。(b) 在温度-压强空间下的相图，阴影部分为金属绝缘共存态[150]。

Figure 5.3 (a) Conductivity measured in decreasing and increasing pressure sweeps at different temperatures for $V_{2-x}Cr_xO_3$. The hysteresis cycle is shown for $T = 290\text{K}$ and $T = 348\text{K}$. (b) Phase diagram of $V_{2-x}Cr_xO_3$ as a function of pressure and temperature. The shaded region shows the coexistence regime of metal and insulator states[150].

早期的实验在用 Cr 或者 Ti 掺杂的 V_2O_3 中实现了 Mott 相变[149]，其相图如图5.2所示，在低压强部分存在一个顺磁 Mott 绝缘态，并且随着压强的增加系统

转变为金属态。在后来对 $V_{2-x}Cr_xO_3$ 研究中，对电导率的系统分析表明 Mott 相变为一个一阶相变，在相图上存在共存区，如图5.3所示。在图5.3(a) 中，给定一个温度，然后从逐渐增加和减少压强的方向测量其电导率发现存在一个明显的回滞现象。图5.3(b) 给出了其相图，其中阴影部分表示金属和绝缘共存的区域。进一步对电导率临界行为的分析发现，其在临界点附近的标度行为与气液相变的一致[150]，那么，量子的 Mott 相变系统是否能够映射到一个经典的气液相变的系统呢?

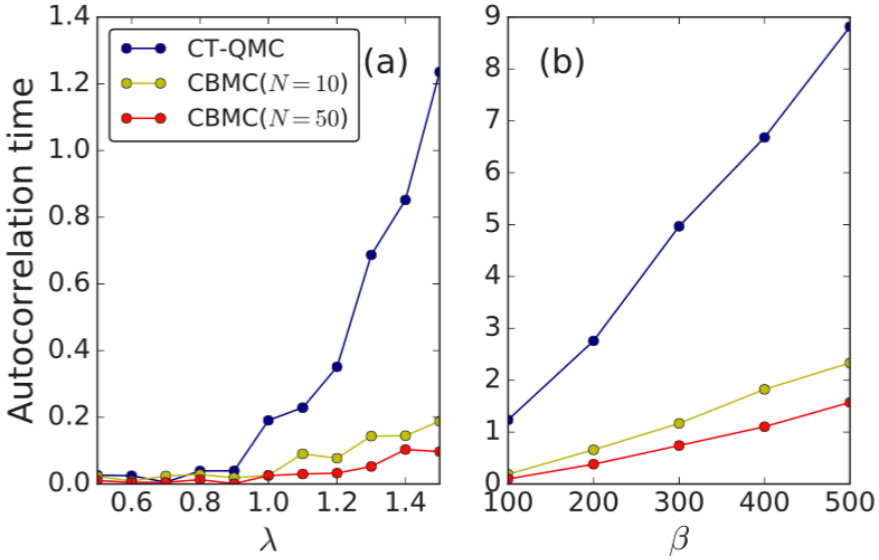

图 5.4 不同参数下的自关联时间。(a) 给定温度 $\beta = 100$，自关联时间随着杂化强度 λ 的变化情况。(b) 给定 $\lambda = 1.5$，自关联时间随 β 的变化情况[151]。

Figure 5.4 The autocorrelation times for different parameters. (a) The autocorrelation time for various hybridization strength λ and fixed $\beta = 100$. (b) The autocorrelation time for various β and fixed $\lambda = 1.5$[151].

在凝聚态物理研究中，量子到经典的映射是一个很重要的研究方法[152–165]，这种映射通常是将配分函数展开，然后将这一系列展开项用经典系统去描述，由于这些展开项会非常复杂，这种映射往往会受到限制。近年来，随着机器学习的发展[166–172]，人们尝试利用机器学习来将量子模型映射为经典模型，并用于加速量子蒙特卡罗方法[151,173–175]。Huang 在他的工作中，将相互作用展开的连续时间量子蒙特卡罗中的位形映射到一个经典模型[151]，然后给出这个模型的能量表示形式，其中最主要的为一个势函数，通过将量子位形的权重 $\omega(C)$ 与经典模型的能量 $E_{\text{eff}}(C)$ 相对应，可以拟合出这个势函数的具体形式。对于这个等效的经典模型可以使用一些高效的经典蒙特卡罗方法来计算，比如 configurational-bias

Monte Carlo（CBMC）[176] 方法，在这种方法下可以得到新接收概率：$p(C \to C') = \min\left\{1, \frac{e^{-E_{\mathrm{eff}}(C)}}{e^{-E_{\mathrm{eff}}(C')}} \frac{\omega(C')}{\omega(C)}\right\}$，通过这种方式可以提高抽样效率，减少位形之间的自关联。如图5.4所示，可以看到通过这个方式得到的位形之间的自关联时间大大的减少，尤其是在杂化强度大温度低（β 较大）的区域。自关联时间减少意味着我们可以得到更多的相互独立的样本从而可以减少统计不确定性。而从物理的角度来看，我们相信在这种映射下，原来量子系统的行为，如 Mott 相变，也会相应地在经典系统中反应出来，而这个经典系统中相互作用的形式或许可以帮助我们更深的理解其物理图像。

5.2 模型与方法

我们讨论单带半满情况下的 Hubbard 模型：

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \mathrm{h.c.}) + U \sum_{i} \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right), \tag{5.1}$$

其中 t 为最近邻格点的跃迁系数，U 为在位的电子间的库仑相互作用强度。考虑 Bethe lattice，无相互作用的态密度为半圆形，$\rho_0(\epsilon) = \frac{1}{2\pi t}\sqrt{4t^2 - \epsilon^2}$。其中 $t = 1.0$ 作为能量单位，同时为了简单起见，我们只考虑顺磁的情况。图5.5为我们计算得到的相图，U_{c2} 为从金属态开始算得到的临界 U，U_{c1} 为从绝缘态开始算得到的临界 U，在低温区域，随着 U 的增加可以看到系统从金属态变为绝缘态。黑色圆点标记临界端点，阴影区域为金属绝缘共存区。图5.5中插图为 Bethe 晶格和 DMFT 过程的示意图。

参考第2章，我们知道对于 CT-HYB 杂质求解器，配分函数写成如下形式，

$$Z \propto \sum_{k,\tilde{k}=0}^{\infty} \int_0^{\beta} \prod_{i=1}^{k} (d\tau_i d\tau_i') \prod_{j=1}^{\tilde{k}} (d\tilde{\tau}_j d\tilde{\tau}_j') \omega_{\mathrm{loc}} \omega_{\mathrm{hyb}}, \tag{5.2}$$

其中，$\omega_{\mathrm{loc}} = e^{U(L_{\mathrm{tot}}/2 - O_{\mathrm{tot}})}$ 和 $\omega_{\mathrm{hyb}} = |\det M^{-1}(\Delta)|$ 分别对应于不同自旋的位形（$\{C_k : \tau_1, \tau_1'; \cdots; \tau_k, \tau_k'\}$ 和 $\{C_{\tilde{k}} : \tilde{\tau}_1, \tilde{\tau}_1'; \cdots; \tilde{\tau}_{\tilde{k}}, \tilde{\tau}_{\tilde{k}}'\}$）的局域和杂化部分的权重，$k$ 和 $\tilde{k}$ 分别为其展开阶数，Δ 为杂化函数。L_{tot} 为所有段的长度之和，而 O_{tot} 表示不同自旋 flavor 之间交叠部分（阴影区域）长度之和。$M^{-1}(\Delta)$ 为一个 $(k+\tilde{k})\times(k+\tilde{k})$ 的矩阵，其矩阵元由杂化函数和各个算符的虚时坐标决定。模型中没有自旋翻转项，杂化部分的权重可以写成：$\omega_{\mathrm{hyb}} = \omega^{\uparrow}_{\mathrm{hyb}}(C_k)\omega^{\downarrow}_{\mathrm{hyb}}(C_{\tilde{k}})$。

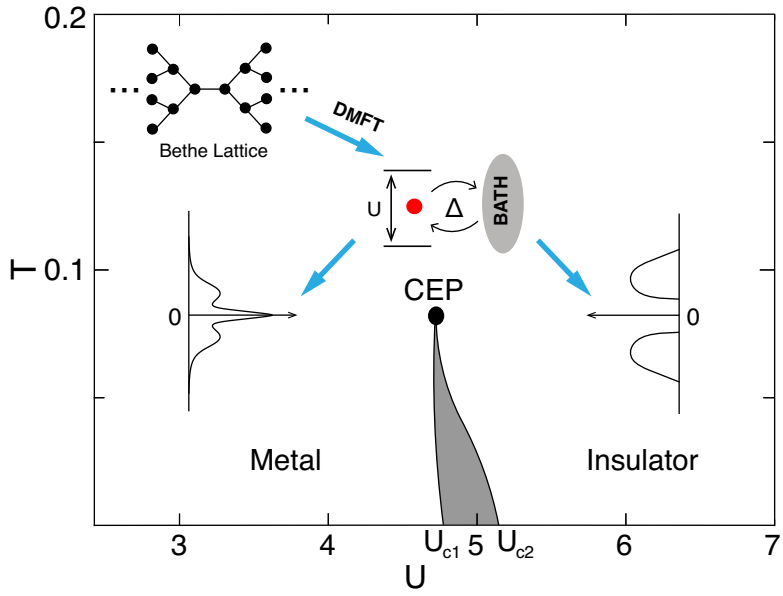

图 5.5 半满 Bethe 晶格 Hubbard 模型的顺磁相图，U_{c2} 为从金属态开始算得到的临界 U，U_{c1} 为从绝缘态开始算得到的临界 U。临界端点由黑色圆点标记，阴影区域为金属绝缘共存区。插图为 Bethe 晶格和 DMFT 过程的示意图，以及典型的金属态和绝缘态态密度形式。

Figure 5.5 The phase diagram of half-filled HM on the Bethe lattice in the paramagnetic phase. U_{c2} is the critical U from the metallic side and U_{c1} from the insulating side. The black solid circle marks the critical end point(CEP) and the shadow region indicates the coexist of insulator and metal solutions. The insert shows a sketch picture of a DMFT procedure which maps a lattice model into an impurity one and then it is solved self consistently.

观察可以发现局域部分的权重 ω_{loc} 是由段的长度来表示，其对数形式与各个点的坐标为一个线性关系，也就具有了一个经典形式，所以我们主要关注杂化部分的权重 ω_{hyb}。由于考虑顺磁态，两自旋 flavor 具有相同的分布函数，于是我们可以只考虑一个自旋方向的计算，然后将它们通过 ω_{loc} 联系起来。类似于 Huang[151] 的做法，我们可以将量子的位形映射到一个经典系统，如图5.6所示，其中我们把虚时间 τ_i (τ_i') 上的一个产生（消灭）算符映射成经典模型中的一个带电荷 $q_i = +(-)$ 的粒子，这些粒子的坐标为：$x_i^+ = \tau_i/\beta$, $x_i^- = \tau_i'/\beta$, $\tilde{x}_i^+ = \tilde{\tau}_i/\beta$ 以及 $\tilde{x}_i^- = \tilde{\tau}_i'/\beta$，其中 β 为系统温度的倒数。

接下来就是用一个经典模型来重现各个位形的权重，也就是说使得其经典能量与各个位形权重的对数相等。考虑最简单的能量形式:

$$E_{\text{eff}}(C_k) = -\frac{1}{2}\sum'_{i,q_i;j,q_j} V_{q_iq_j}(x_j^{q_j} - x_i^{q_i}) + \mu_{\text{eff}}k + E_0, \tag{5.3}$$

其中 $V_{q_iq_j}(x_j^{q_j} - x_i^{q_i})$ 是经典模型中的两体势，它为不同粒子的电荷与坐标的函数，E_0 为一个背景常数，μ_{eff} 为经典模型的等效化学式，$\sum'$ 表示避免所有的自相互

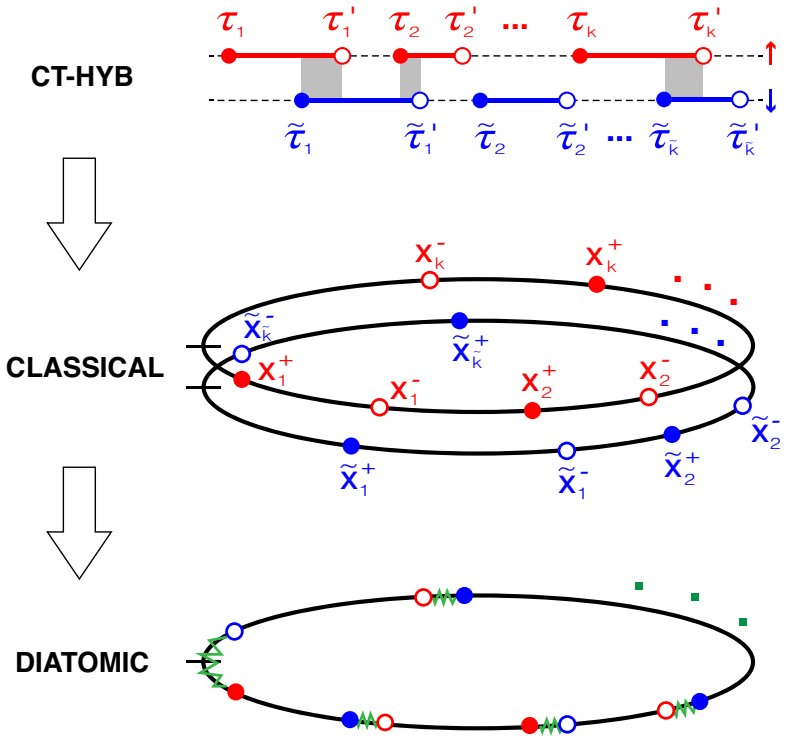

图 5.6 CT-HYB 位形到经典系统的映射。虚时间 τ_i (τ_i') 上的一个产生 (消灭) 算符映射成经典模型中的一个带电荷 $q_i = +(-)$ 的粒子，它们的坐标为：$x_i^+ = \tau_i/\beta$, $x_i^- = \tau_i'/\beta$, $\tilde{x}_i^+ = \tilde{\tau}_i/\beta$ 以及 $\tilde{x}_i^- = \tilde{\tau}_i'/\beta$。最下方为一个双原子模型示意图。

Figure 5.6 Map the CT-HYB configuration to the classical system. In the classic model, the circles at $x_i^+ = \tau_i/\beta$, $x_i^- = \tau_i'/\beta$, $\tilde{x}_i^+ = \tilde{\tau}_i/\beta$ and $\tilde{x}_i^- = \tilde{\tau}_i'/\beta$ represent charged particles. The sketch diagram of a diatomic model shows at the bottom.

作用。

为了得到势函数的具体形式，我们对其做 Legendre 展开：

$$V_{q_iq_j}(x) = \sum_{l=0} V_{q_iq_j}^l P_l(2x-1), \tag{5.4}$$

其中 $0 \le x \le 1$，$P_l(x)$ 为第 l 阶 Legendre 多项式，在实际的计算中往往需要做截断。这样这个经典模型可以完全由 $V_{q_iq_j}^l$ 以及 μ_{eff} 来确定，为了确定这些参数，我们可以利用大量的位形样本进行线性回归使得 $-E_{\text{eff}}(C_k)$ 与 $\ln \omega_{\text{hyb}}^{\sigma}(C_k)$ 近似相等。

对于每一组参数，首先进行一个常规的 DMFT 计算，利用最后收敛后的结果再进行一次额外的计算，用于输出相应的采样位形以及相应的权重。我们采样了 $N_0 = 250000$ 个样本，然后利用一个回归过程来最小化 $\|\mathrm{X}\omega - y\|_2^2 + \alpha \|\omega\|_2^2$，其中 α 设置为 0.001，$\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_p)^T$ 为相应的拟合系数，在这个计算中，$\omega = (\omega_1, \ldots, \omega_p)^T = (V_{++}^0, V_{+-}^0, V_{-+}^0, V_{--}^0 \ldots, V_{++}^{l_m-1}, V_{+-}^{l_m-1}, V_{-+}^{l_m-1}, V_{--}^{l_m-1})^T$，即为由各阶

展开系数组成的向量，$l_m = 30$ 为高阶截断参数。X 为一个由位形决定的矩阵，其大小为 $N_0 \times (4l_m + 2)$。y 为目标值，即由 $\ln \omega^{\sigma}_{\mathrm{hyb}}(C_k)$ 组成的向量。

5.3　计算结果

5.3.1　经典映射的测试

针对一组特定的参数 $U = 3$，$\beta = 30$，我们检查其拟合情况，结果如图5.7所示。图5.7(a)、(b) 我们比较了经典模型的能量与量子位形的权重，发现两者符合

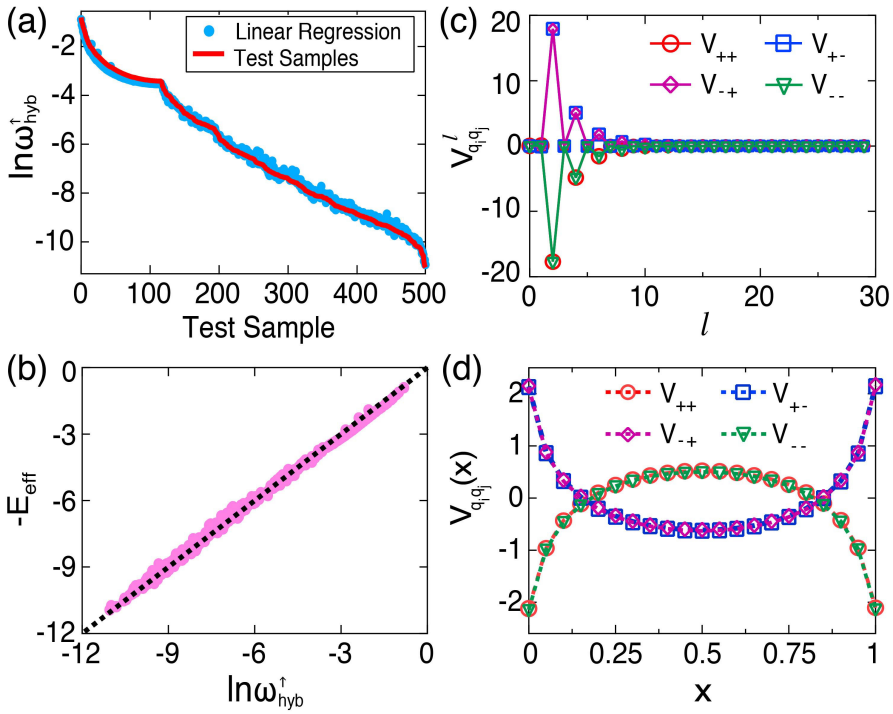

图 5.7 CT-HYB 位形的经典模型的建立。(a) 测试样本的权重的对数与拟合的权重对数间的比较。(b) 比较杂化部分的权重的对数与经典模型的能量 $-E_{\mathrm{eff}}$。(c) 经典模型中的两体相互作用的 Legendre 展开系数 $V^{l}_{q_i q_j}$。(d) 经典模型中的两体相互作用 $V_{q_i q_j}(x)$ 随距离 x 的变化情况。相应的参数为 $U = 3, \beta = 30$。

Figure 5.7 Construction of the classical model for CT-HYB configurations. (a) Comparison between the log-weight and the regression results of choosing test samples. (b) Comparison between the log-weight and the effective classical energy, $-E_{\mathrm{eff}}$. (c) The Legendre coefficients $V^{l}_{q_i q_j}$ of the two-body interactions. (d) $V_{q_i q_j}(x)$ as functions of the distance x. The parameters are $U = 3$ and $\beta = 30$.

得很好，说明我们的等效经典模型是有效的。图5.7(c) 为 Legendre 系数 $V^{l}_{q_i q_j}$，它们在 l 较大的时候很快地收敛，表明我们所取得高阶截断是合理的。图5.7(d) 展示了相应的两体势函数，可以发现其具有一些对称性。由于这个经典模型是在一个单位圆上，我们可以看到 $V(x) = V(1-x)$，关于 $x = 1/2$ 对称；考虑插入一个

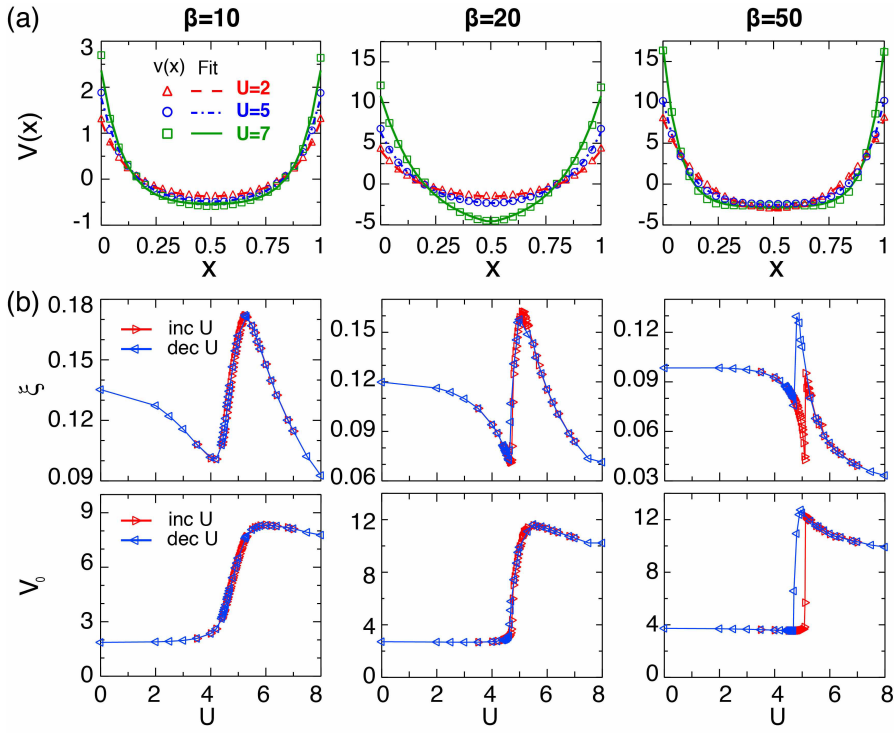

图 5.8 (a) 对于不同参数 U 和 β，等效相互作用势函数形式的拟合。(b) 经典模型中的拟合参数 V_0，ξ 在给定 $\beta = 10, 20, 30$ 情况下的变化情况，($\triangleright$) 表示逐渐增加 U 的情况，($\triangleleft$) 表示逐渐减少 U 的情况。

Figure 5.8 (a) Exponential fit of the effective potential for various parameters. (b) The fitting results of V_0 and ξ with gradually increasing ($\triangleright$) or decreasing ($\triangleleft$) U .

长度为 0 的段，将不改变位形的权重，对应到经典模型中也就是在同一个位置插入一对带电相反的粒子不会改变体系的能量，它们与另外一个粒子之间的能量贡献能够抵消，这就意味着 $V_{++} = V_{--} = -V_{-+} = -V_{+-} = -q_i q_j V(x)$。

5.3.2 势函数的拟合以及拟合参数的行为

势函数 $V(x)$ 的形式是这个经典系统最重要的信息，我们发现无论是在金属态还是在绝缘态，它可以用一个指数函数:

$$V(x) = V_0 e^{-\min\{x,1-x\}/\xi} + V_1, \tag{5.5}$$

来拟合，其中 V_0 和 V_1 都是常数，ξ 反应了两体相互作用的等效作用范围。其拟合结果如图5.8(a) 所示，由于我们所处理的是与单杂质模型自洽耦合的浴，这样的一个指数的衰减意味着系统晶格的作用导致了一个由有限特征长度 ξ 所决定的局域的屏蔽作用。

这个指数形式的相互作用势可以进一步的化简，由于在所有位形中，带电的粒子总是成对出现，整体的效果是给能量加上一个 $-V_1 k$ 项，可以吸收到 μ_{eff} 中

去，重新定义 $(\mu_{\text{eff}} - V_1) \to \mu_{\text{eff}}$。同时，考虑插入 N 个长度为 0 的段，总能量的变化应该为 0，这就意味着 $\delta E_{eff} = -V_0 N + \mu_{\text{eff}} N = 0$，这需要 $\mu_{\text{eff}} = V_0$，与计算结果近似吻合。也就是说在这个等效模型中，只需要两个参数，系统的总能量可以近似写成:

$$E_{\text{eff}}(C_k) - E_0 = \frac{V_0}{2} \sum_{i,q_i;\, j,q_j} q_i q_j e^{-\delta_{q_j q_i}/\xi}, \tag{5.6}$$

其中，$\delta_{q_j q_i} = \min\{|x_j^{q_j} - x_i^{q_i}|, 1 - |x_j^{q_j} - x_i^{q_i}|\}$ 表示两个粒子之间的距离。于是，对于不同参数 U，β 下的 Hubbard 模型，Mott 相变的信息可以反映到这两个参数 V_0, ξ 上。图5.8(b) 展示了它们在不同的温度 $(T = 1/\beta)$，$\beta = 10, 20, 50$ 的情况下随着 U 的变化情况。其中的结果分别是在相同的 β，从 $U = 0$（金属）开始，逐渐增加 U（Increasing U）和从 $U = 8$ 开始（绝缘）逐渐减小 U（decreasing U）计算得到，对于每一个 U 都将前一个 U 最终收敛的结果作为新的计算的初始输入。我们可以看到在 $\beta = 50$ 的时候，拟合参数有一个明显的跳跃以及回滞现象，这个回滞区域即为金属和绝缘的共存区域。而在 $\beta = 10$ 的时候，也就是在 Mott 临界端点之上，参数的突变变成了一个光滑的过渡。

图5.9(a) 展示了 V_0 随着参数 U，β 的变化情况，可以看到在发生相变的时候其发生变化，而在不同的相中只是微小改变。在低温发生 Mott 相变的时候，V_0 有一个快速的突变，而在高温的时候，表现为一个光滑的过渡，图中箭头方向表明在 DMFT 计算过程中增加 U（红色虚线）和减少 U（蓝色实线）的计算结果，黑色点线标志着金属绝缘共存的回滞区域。图5.9(b) 展示了粒子数 $\langle k \rangle$ 随着参数的变化情况。在随着 β 变化的时候，其斜率在发生 Mott 相变时发生改变，绝缘态的斜率比金属态的斜率更小。图5.9(b) 插图表明粒子密度 $\langle k \rangle/\beta$ 与双占据 $\langle D \rangle$ 在临界点附近近似的线性关系，由于 $\langle k \rangle$ 与系统的动能有关，$\langle D \rangle$ 与系统的势能有关，这意味着在 Mott 相变的时候，系统的动能和势能存在一定的关系。因此，我们可以看到 $\langle k \rangle$ 的变化包含了关于 Mott 相变的一些信息。

图5.10(a) 展示了在 $\beta = 50$ 的时候在增加和减少 U 情况下的参数流。V_0 在绝缘和金属态都变化很小直到 Mott 相变发生，而 ξ 变化很大，可以认为 ξ 为相变发生的主要的驱动作用。由于 ξ 反映了经典模型中的两体相互作用的有效长度 (effective range)，这个相变是被两个粒子的散射长度所控制的。我们发现，ξ 关于临界的 U 有对数的依赖关系，$\xi \sim \pm|1 - U/U_c|$，这就意味着这个等效的相互作用在靠近 Mott 转变的时候会变成一个短程或者长程的作用。从金属态出发，当

$U \to U_{c2}$，这个相互作用变得局域，粒子逐渐变成自由粒子，最终成为“气态”；而从绝缘态出发，当 $U \to U_{c1}$，ξ 慢慢变得发散，粒子间的关联越来越强直到最终成为“液态”；因此，从这个角度来看 Mott 金属绝缘相变可以对应到一个经典的液气相变。在从金属绝缘的转变过程中，可能类似于气液相变中的成核长大过程，在金属（绝缘）相的边缘由于局部涨落出现了部分局域（退局域）化，从而进入共存区域，并最终转变到绝缘（金属）相，这意味着 Mott 相变中也存在着两阶

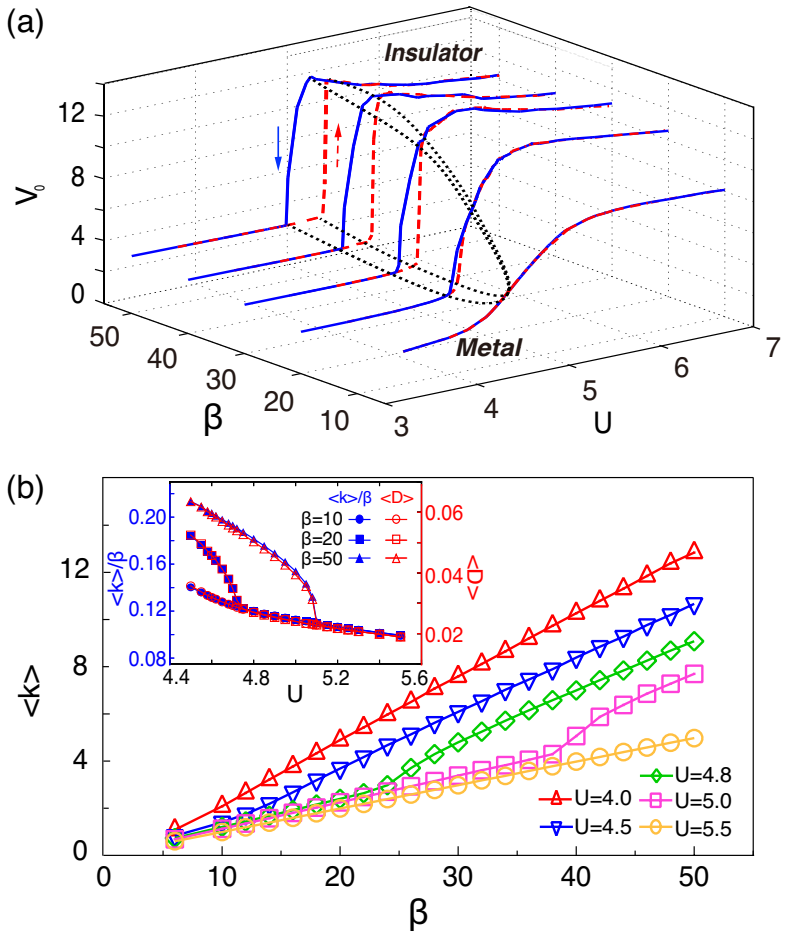

图 **5.9 (a)** 不同参数下的 V_0 的变化情况。在低温发生 **Mott** 相变的时候，V_0 有一个快速的突变，而在高温的时候，表现为一个光滑的过渡。箭头方向表明在 **DMFT** 计算过程中增加 U（红色虚线）和减少 U（蓝色实线）的计算结果。黑色点线标志着一阶相变的回滞区域。**(b)** 在增加 U 的计算中，不同 U 下，粒子对个数 $\langle k \rangle$ 随着 β 的变化情况，在发生 **Mott** 相变的时候，斜率出现了变化。插图比较了粒子对密度与双占据数。

Figure 5.9 (a) Variations of V_0 for different parameters, showing a rapid change across the Mott transition and slight change in other regimes. The arrows show the direction of decreasing (solid line) or increasing (dashed line) U during the calculation. The dotted lines indicate the hysteresis region of the first-order transition. (b) The pair number, $\langle k \rangle$, as a function of the inverse temperature β for different values of U. The pair density, $\mathrm{d}\langle k \rangle/\mathrm{d}\beta$, changes across the Mott transition.

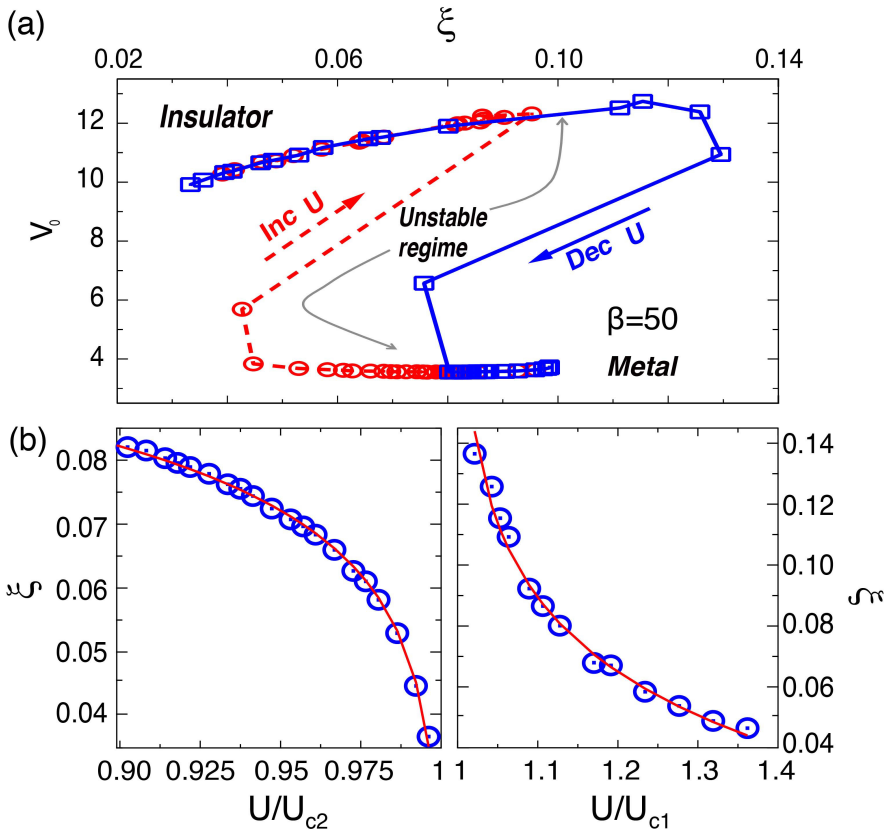

图 5.10 (a) 在 $V_0 - \xi$ 空间中，在 $\beta = 50$ 的情况下，随着 U 变化的参数流。(b) 从不同的方向靠近临界点时，有效作用长度 ξ 的对数拟合情况。

Figure 5.10 (a) The parameter flow on the $V_0 - \xi$ space at $\beta = 50$. Circles for increasing and squares for decreasing U (b) Logarithmic fit (solid lines) of the effective length, ξ, from the metal and insulator side for $\beta = 50$.

段过程。

这个经典的对应在一定程度上提供了一种新的观点来看待 Mott 物理的自旋和电荷动力学。当我们将原来的 ω_{loc} 加入能量的计算，在 U 很大的情况，所有的段将覆盖整个圆来减少重复的区域和库仑作用带来的能量，因此每一个带电粒子将紧挨着另一个自旋 flavor 上带有相反电荷的粒子。这样将两个自旋方向对应的圆可以合并成一个，对应的经典模型变成一个双原子气体，如图5.6所示，电荷和自旋的涨落对应着这个模型中的相对运动和集体运动的模式。

5.4　本章小结

在本章中，我们在 DMFT(CT-HYB) 的框架下建立了半满 Hubbard 模型中的 Mott 相变与一个等效经典模型的对应。这个经典模型可以看作是一种具有指数形式的两体相互作用的经典系统，而 Mott 相变可以对应于这个经典系统中由有

效相互作用长度 ξ 所驱动的气液相变，在相变点附近，ξ 表现出对数的发散行为。需要注意的是这个工作中的对应是在 DMFT 框架下得到的，对于一些其他的精确处理晶格模型方法来说，类似的两体相互作用形式是否适用还需要更多的研究。在 DMFT 框架下存在一个金属绝缘的共存区域，这个区域可能反映了 Mott 相变中的两阶段过程，类似于气液相变中的成核长大过程，在共存区中经历了部分局域（退局域）过程。

第 6 章　总结与展望

本论文利用了强关联领域数值计算方法，如行列式蒙特卡罗、动力学平均场等等，对周期性 Anderson 模型中的杂化涨落以及 Hubbard 模型中 Mott 转变的经典对应进行了研究，给出了一些新的观点。

论文第一章为引言，主要介绍了强关联电子系统的一些基本概念和主要研究的基本模型，以及重费米子物理的基础和两阶段杂化图像的提出。

第二章主要介绍了强关联领域的数值计算方法，包括求解晶格模型的行列式蒙特卡罗方法（DQMC），以及利用将晶格模型映射到单杂质模型然后自洽求解的动力学平均场方法（DMFT）。以数值重整化群（NRG）和杂化展开连续时间蒙特卡罗方法（CT-HYB）说明 DMFT 中的核心：杂质求解器。

在第三章中，我们利用 DQMC 方法研究了周期性 Anderson 模型中的杂化涨落，通过计算和分析杂化关联函数发现，在不同的参数区间杂化关联函数有四种不同的特征，并以此可以得到一个相应相图。在这个相图上，我们发现在非杂化的 Mott 区域和完全杂化的 Kondo 绝缘体区之间存在一个过渡区域，在这个过渡区域内具有低能杂化涨落和能带弯曲现象，这证实了最近的 ARPES 和超快激光泵浦-探测实验提出的两阶段杂化图像。

在第四章中，通过 DMFT(NRG) 研究了半满周期性 Anderson 模型和 Hubbard 模型中的能标对应，揭示了 Mott 物理与 Kondo 晶格物理之间的联系。基于两个不同的能标建立了相关的相图，低能能标（kink）为低能相干态的上边界而高能能标（Ω）为非相干态的下边界。表明强关联晶格系统中存在一个普适的两阶段过程，从完全局域态出发，经历一个部分退局域化的过渡态，最终形成长程相干态。

在第五章中，我们通过强关联计算方法与机器学习相结合，给出了 Hubbard 模型中的 Mott 转变的一种经典对应。在 DMFT 的框架下，利用 CT-HYB 作为杂质求解器，这个对应的经典系统具有指数形式的两体相互作用。Mott 相变可以对应于这个经典系统中由有效相互作用长度 ξ 所驱动的气液相变，在临界点附近 ξ 具有对数发散行为。金属绝缘的共存区域可能反映了 Mott 相变中的两阶段过程。

在强关联电子系统中，存在各种不同的计算方法，它们各自具有不同的优势和劣势，主要应用于计算系统不同的物理。今后可以从两个方向出发，一个是学习和发展新的计算方法，比如在 DMFT 中考虑空间关联、零温或极低温的高效的 QMC 方法等等，可以展开更精细可靠的计算；另一个是考虑定义一些新的物理量的计算，通过这些物理量来分析和说明系统的新奇物理性质，从新的角度去认识系统中的物理。

参考文献

[1] Mott N F. The transition to the metallic state. *Philos. Mag.*, 1961, **6**(62):287.

[2] Zhang X Y, Rozenberg M J, Kotliar G. Mott transition in the $d = \infty$ Hubbard model at zero temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(11):1666.

[3] Hasan M Z, Isaacs E D, Shen Z, et al. Electronic structure of Mott insulators studied by inelastic X-ray scattering. *Science*, 2000, **288**(5472):1811.

[4] Jarrett H S, Cloud W H, Bouchard R J, et al. Evidence for itinerantd-electron ferromagnetism. *Phys. Rev. Lett.*, 1968, **21**(9):617.

[5] Moriya T. Springer series in solid-state sciences: Spin fluctuations in itinerant electron magnetism. Springer, Berlin, Heidelberg, 1985.

[6] Turek I, Kudrnovsky J, Drchal V, et al. Itinerant magnetism of disordered Fe-Co and Ni-Cu alloys in two and three dimensions. *Phys. Rev. B*, 1994, **49**(5):3352.

[7] Martinek J, Sindel M, Borda L, et al. Kondo effect in the presence of itinerant-electron ferromagnetism studied with the numerical renormalization group method. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**(24):247202.

[8] Andres K, Graebner J E, Ott H R. 4f-Virtual-Bound-State Formation in $CeAl_3$ at Low Temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 1975, **35**(26):1779.

[9] Stewart G R. Heavy-fermion systems. *Rev. Mod. Phys.*, 1984, **56**(4):755.

[10] Kondo S, Johnston D C, Swenson C A, et al. LiV_2O_4: A heavy fermion transition metal oxide. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**(19):3729.

[11] Urano C, Nohara M, Kondo S, et al. LiV_2O_4 spinel as a heavy-mass fermi liquid: anomalous transport and role of geometrical frustration. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **85**(5):1052.

[12] Fulde P, Yaresko A N, Zvyagin A A, et al. On the origin of heavy quasiparticles in LiV_2O_4. *Europhys. Lett.*, 2001, **54**(6):779.

[13] Kaps H, Brando M, Trinkl W, et al. Heavy fermions in LiV_2O_4: Kondo compensation versus geometric frustration. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2001, **13**(37):8497.

[14] Kadono R, Koda A, Higemoto W, et al. Quasi-One-Dimensional Spin Dynamics in LiV_2O_4: One-to-Three-Dimensional Crossover as a Possible Origin of Heavy Fermion State. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2012, **81**(1):014709.

[15] Cheng J G, Zhou J S, Yang Y F, et al. Possible Kondo physics near a metal-insulator crossover in the a-site ordered perovskite $CaCu_3Ir_4O_{12}$. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **111**(17):176403.

[16] Urushibara A, Moritomo Y, Arima T, et al. Insulator-metal transition and giant magnetoresistance in $La_{1-x}Sr_xMnO_3$. *Phys. Rev. B*, 1995, **51**(20):14103.

[17] Ramirez A P. Colossal magnetoresistance. *J. Phys. Condens. Matter*, 1997, **9**(39):8171.

[18] Tallon J L, Bernhard C, Shaked H, et al. Generic superconducting phase behavior in high-T_c cuprates: T_c variation with hole concentration in $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. *Phys. Rev. B*, 1995, **51**(18): 12911.

[19] Fukuzumi Y, Mizuhashi K, Takenaka K, et al. Cuprates in the underdoped regime. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **76**(4):684.

[20] Damascelli A, Hussain Z, Shen Z X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 2003, **75**(2):473.

[21] Armitage N P, Fournier P, Greene R L. Progress and perspectives on electron-doped cuprates. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, **82**(3):2421.

[22] Scalapino D J. A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 2012, **84**(4):1383.

[23] Coleman P. Introduction to many-body physics. Cambridge University Press, 2016.

[24] Imada M, Fujimori A, Tokura Y. Metal-insulator transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 1998, **70**(4): 1039.

[25] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. R. Soc. London*, 1963, **276** (1365):238.

[26] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 1964, **277**(1369):237.

[27] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. III. An improved solution. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 1964, **281**(1386):401.

[28] Chao K A, Spalek J, Oles A M. Kinetic exchange interaction in a narrow s-band. *J. Phys. C*, 1977, **10**(10):271.

[29] Anderson P W. New approach to the theory of superexchange interactions. *Phys. Rev.*, 1959, **115**(1):2-13.

[30] Izyumov Y A. Strongly correlated electrons: the t-J model. *Physics-Uspekhi*, 1997, **40**(5): 445.

[31] Anderson P W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 1961, **124**(1):41.

[32] Benlagra A, Pruschke T, Vojta M. Finite-temperature spectra and quasiparticle interference in Kondo lattices: From light electrons to coherent heavy quasiparticles. *Phys. Rev. B*, 2011, **84**(19).

[33] Kouwenhoven L, Glazman L. Revival of the Kondo effect. *Phys. World*, 2001, **14**(1):33.

[34] Kondo J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Prog. Theor. Phys.*, 1964, **32**(1):37.

[35] Wilson K G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 1975, **47**(4):773.

[36] Ruderman M A, Kittel C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys. Rev.*, 1954, **96**(1):99.

[37] Kasuya T. Electrical resistance of ferromagnetic metals. *Prog. Theor. Phys.*, 1956, **16**(1):58.

[38] Yosida K. Magnetic properties of Cu-Mn alloys. *Phys. Rev.*, 1957, **106**(5):893.

[39] Doniach S. The Kondo lattice and weak antiferromagnetism. *Physica B+C*, 1977, **91**:231.

[40] Wirth S, Steglich F. Exploring heavy fermions from macroscopic to microscopic length scales. *Nat. Rev. Mater.*, 2016, **1**(10):1.

[41] Chen Q Y, Xu D F, Niu X H, et al. Direct observation of how the heavy-fermion state develops in $CeCoIn_5$. *Phys. Rev. B*, 2017, **96**(4):045107.

[42] Liu Y P, Zhang Y J, Dong J J, et al. Hybridization dynamics in $cecoin_5$ revealed by ultrafast optical spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, **124**(5):057404.

[43] Caffarel M, Krauth W. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **72**(10):1545.

[44] Bulla R, Costi T A, Pruschke T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Rev. Mod. Phys.*, 2008, **80**(2):395.

[45] White S R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, **69**(19):2863.

[46] Hirsch J E, Fye R M. Monte Carlo method for magnetic impurities in metals. *Phys. Rev. Lett*, 1986, **56**(23):2521.

[47] Georges A, Kotliar G, Krauth W, et al. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 1996, **68**(1):13.

[48] Blankenbecler R, Scalapino D J, Sugar R L. Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I. *Phys. Rev. D*, 1981, **24**(8):2278.

[49] Assaad F F, Evertz H G. Lecture notes in physics: World-line and determinantal quantum Monte Carlo methods for spins, Phonons and Electrons. 2008: 277.

[50] Rubtsov A N, Lichtenstein A I. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions: Beyond auxiliary field framework. *JETP Lett.*, 2004, **80**(1):61.

[51] Werner P, Comanac A, de' Medici L, et al. Continuous-time solver for quantum impurity models. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, **97**(7):076405.

[52] Gull E, Millis A J, Lichtenstein A I, et al. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, **83**(2):349.

[53] Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 1953, **21**(6):1087.

[54] Hastings W K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 1970, **57**(1):97.

[55] Metzner W, Vollhardt D. Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensionas. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **62**(3):324.

[56] Held K. Electronic structure calculations using dynamical mean field theory. *Adv. Phys.*, 2007, **56**(6):829.

[57] Georges A, Kotliar G. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*, 1992, **45**(12): 6479.

[58] Kotliar G, Vollhardt D. Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory. *Phys. Today*, 2004, **57**(3):53.

[59] Lanczos C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 1950, **45**(4):255.

[60] Cullum J K, Willoughby R A. Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations vol. ii programs. Boston, USA: Birkhäuser Boston, 1984.

[61] Weiße A, Fehske H. Exact diagonalization techniques. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008: 529.

[62] Hewson A C. The Kondo Problem to Heavy Fermions. Combridge, England: Combridge University Press, 1997.

[63] Mott N F. Rare-earth compounds with mixed valencies. *Philos. Mag.*, 1974, **30**(2):403.

[64] Coleman P. 1/N expansion for the Kondo lattice. *Phys. Rev. B*, 1983, **28**(9):5255.

[65] Yang Y F, Pines D. Universal behavior in heavy-electron materials. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**(9):096404.

[66] Read N, Newns D M. On the solution of the Coqblin-Schreiffer Hamiltonian by the large-N expansion technique. *J. Phys. C*, 1983, **16**(17):3273.

[67] Auerbach A, Levin K. Kondo bosons and the Kondo lattice: Microscopic basis for the heavy fermi liquid. *Phys. Rev. Lett.*, 1986, **57**(7):877.

[68] Coleman P. New approach to the mixed-valence problem. *Phys. Rev. B*, 1984, **29**(6):3035.

[69] Millis A J, Lee P A. Large-orbital-degeneracy expansion for the lattice Anderson model. *Phys. Rev. B*, 1987, **35**(7):3394.

[70] Newns D M, Read N. Mean-field theory of intermediate valence/heavy fermion systems. *Adv. Phys.*, 1987, **36**(6):799.

[71] Zhang G M, Yu L. Kondo singlet state coexisting with antiferromagnetic long-range order: A possible ground state for Kondo insulators. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(1):76.

[72] Burdin S, Zlatic V. Multiple temperature scales of the periodic Anderson model: Slave boson approach. *Phys. Rev. B*, 2009, **79**(11):115139.

[73] Dzero M, Sun K, Galitski V, et al. Topological Kondo insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, **104** (10):106408.

[74] Dubi Y. Hybridization wave as the "hidden order" in URu_2Si_2. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, **106** (8):086401.

[75] Ramires A, Coleman P, Nevidomskyy A H, et al. $\beta-YbAlB_4$: A critical nodal metal. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**(17):176404.

[76] Iglesias J R, Lacroix C, Coqblin B. Revisited Doniach diagram: Influence of short-range antiferromagnetic correlations in the Kondo lattice. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**(18):11820.

[77] Burdin S, Georges A, Grempel D R. Coherence scale of the Kondo lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **85**(5):1048.

[78] Assaad F F. Depleted Kondo lattices: Quantum Monte Carlo and mean-field calculations. *Phys. Rev. B*, 2002, **65**(11):115104.

[79] Paul I, Pépin C, Norman M R. Kondo breakdown and hybridization fluctuations in the Kondo-Heisenberg lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **98**(2):026402.

[80] Paul I, Pépin C, Norman M R. Multiscale fluctuations near a Kondo breakdown quantum critical point. *Phys. Rev. B*, 2008, **78**(3):035109.

[81] Yang Y F, Pines D, Lonzarich G. Quantum critical scaling and fluctuations in Kondo lattice materials. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2017, **114**(24):6250.

[82] Steglich F, Aarts J, Bredl C D, et al. Superconductivity in the presence of strong Pauli paramagnetism: $CeCu_2Si_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 1979, **43**(25):1892.

[83] Sigrist M, Ueda K. Phenomenological theory of unconventional superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, 1991, **63**(2):239.

[84] Stewart G R. Non-fermi-liquid behavior in d- and f-electron metals. *Rev. Mod. Phys.*, 2001, **73**(4):797.

[85] Gegenwart P, Si Q, Steglich F. Quantum criticality in heavy-fermion metals. *Nat. Phys.*, 2008, **4**(3):186.

[86] White B D, Thompson J D, Maple M B. Unconventional superconductivity in heavy-fermion compounds. *Physica C Supercond*, 2015, **514**:246.

[87] Vekic M, Cannon J W, Scalapino D J, et al. Competition between antiferromagnetic order and spin-liquid behavior in the two-dimensional periodic Anderson model at half filling. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **74**(12):2367.

[88] Jiang M, Curro N J, Scalettar R T. Universal Knight shift anomaly in the periodic Anderson model. *Phys. Rev. B*, 2014, **90**(24).

[89] Wei L Y, Yang Y F. Doping-induced perturbation and percolation in the two-dimensional Anderson lattice. *Sci. Rep.*, 2017, **7**:46089.

[90] Costa N C, Mendes-Santos T, Paiva T, et al. Coherence temperature in the diluted periodic Anderson model. *Phys. Rev. B*, 2019, **99**(19).

[91] Bernhard B H, Lacroix C, Iglesias J R, et al. Phase diagram for the Anderson lattice model. *Phys. Rev. B*, 2000, **61**(1):441.

[92] Held K, Huscroft C, Scalettar R T, et al. Similarities between the Hubbard and periodic Anderson models at finite temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **85**(2):373.

[93] Logan D E, Galpin M R, Mannouch J. Mott transitions in the periodic Anderson model. *J. Phys. Condens. Matter*, 2016, **28**(45):455601.

[94] Khait I, Azaria P, Hubig C, et al. Doped Kondo chain, a heavy Luttinger liquid. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2018, **115**(20):5140.

[95] Chen R Y, Wang N L. Infrared properties of heavy fermions: evolution from weak to strong hybridizations. *Rep. Prog. Phys.*, 2016, **79**(6):064502.

[96] Lawson M, Bush B T, Shockley A C, et al. Site-specific Knight shift measurements of the dilute Kondo lattice system $Ce_{1-x}La_xCoIn_5$. *Phys. Rev. B*, 2019, **99**(16):165106.

[97] Pépin C. Kondo breakdown as a selective Mott transition in the Anderson lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **98**(20):206401.

[98] Pépin C. Selective Mott transition and heavy fermions. *Phys. Rev. B*, 2008, **77**(24):245129.

[99] Jarrell M, Akhlaghpour H, Pruschke T. Periodic Anderson model in infinite dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(11):1670.

[100] de' Medici L, Georges A, Kotliar G, et al. Mott transition and Kondo screening in f-electron metals. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**(6):066402.

[101] Shen H, Fu L. Quantum oscillation from in-gap states and a non-hermitian landau level problem. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, **121**(2):026403.

[102] Yoshida T, Peters R, Kawakami N. Non-hermitian perspective of the band structure in heavy-fermion systems. *Phys. Rev. B*, 2018, **98**(3):035141.

[103] Michishita Y, Yoshida T, Peters R. Relationship between exceptional points and the Kondo effect in f-electron materials. 2019:arXiv:1905.12287.

[104] Lanzara A, Bogdanov P V, Zhou X J, et al. Evidence for ubiquitous strong electron–phonon coupling in high-temperature superconductors. *Nature*, 2001, **412**(6846):510.

[105] He H, Sidis Y, Bourges P, et al. Resonant spin excitation in an overdoped high temperature superconductor. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, **86**(8):1610.

[106] Shen Z X, Lanzara A, Ishihara S, et al. Role of the electron-phonon interaction in the strongly correlated cuprate superconductors. *Philos. Mag. B*, 2002, **82**(13):1349.

[107] Meevasana W, Zhou X J, Sahrakorpi S, et al. Hierarchy of multiple many-body interaction scales in high-temperature superconductors. *Phys. Rev. B*, 2007, **75**(17):174506.

[108] Byczuk K, Kollar M, Held K, et al. Kinks in the dispersion of strongly correlated electrons. *Nat. Phys.*, 2007, **3**(3):168.

[109] Nekrasov I A, Held K, Keller G, et al. Momentum-resolved spectral functions of $SrVO_3$ calculated by LDA+DMFT. *Phys. Rev. B*, 2006, **73**(15):155112.

[110] Macridin A, Jarrell M, Maier T, et al. High-energy kink in the single-particle spectra of the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **99**(23):237001.

[111] Grete P, Schmitt S, Raas C, et al. Kinks in the electronic dispersion of the Hubbard model away from half filling. *Phys. Rev. B*, 2011, **84**(20):205104.

[112] Kainz A, Toschi A, Peters R, et al. Kinks in the periodic Anderson model. *Phys. Rev. B*, 2012, **86**(19):195110.

[113] Greger M, Kollar M, Vollhardt D. Emergence of a common energy scale close to the orbital-selective Mott transition. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **110**(4):046403.

[114] Toschi A, Capone M, Castellani C, et al. Kinks in the electronic specific heat. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, **102**(7):076402.

[115] Mravlje J, Aichhorn M, Miyake T, et al. Coherence-incoherence crossover and the mass-renormalization puzzles in Sr_2RuO_4. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, **106**(9):096401.

[116] Deng X, Mravlje J, Žitko R, et al. How bad metals turn good: Spectroscopic signatures of resilient quasiparticles. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **110**(8):086401.

[117] Yang H B, Pan Z H, Sekharan A K P, et al. Fermi surface evolution and Luttinger theorem in Na_xCoO_2: A systematic photoemission study. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**(14):146401.

[118] Iwasawa H, Aiura Y, Saitoh T, et al. Orbital selectivity of the kink in the dispersion of Sr_2RuO_4. *Phys. Rev. B*, 2005, **72**(10):104514.

[119] Yoshida T, Tanaka K, Yagi H, et al. Direct observation of the mass renormalization in $SrVO_3$ by angle resolved photoemission spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**(14):146404.

[120] Ingle N J C, Shen K M, Baumberger F, et al. Quantitative analysis of Sr_2RuO_4 angle-resolved photoemission spectra: Many-body interactions in a model Fermi liquid. *Phys. Rev. B*, 2005, **72**(20):205114.

[121] Valla T, Kidd T E, Yin W G, et al. High-energy kink observed in the electron dispersion of high-temperature cuprate superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **98**(16):167003.

[122] Graf J, Gweon G H, McElroy K, et al. Universal high energy anomaly in the angle-resolved photoemission spectra of high temperature superconductors: Possible evidence of spinon and holon branches. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **98**(6):067004.

[123] Xie B P, Yang K, Shen D W, et al. High-energy scale revival and giant kink in the dispersion of a cuprate superconductor. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, **98**(14):147001.

[124] Aizaki S, Yoshida T, Yoshimatsu K, et al. Self-energy on the low- to high-energy electronic structure of correlated metal $SrVO_3$. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**(5):056401.

[125] Raas C, Grete P, Uhrig G S. Emergent collective modes and kinks in electronic dispersions. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, **102**(7):076406.

[126] Held K, Peters R, Toschi A. Poor man's understanding of kinks originating from strong electronic correlations. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **110**(24):246402.

[127] Bulla R, Pruschke T, Hewson A C. Metal-insulator transition in the Hubbard model. *Physica B: Condens. Matter*, 1999, **259-261**:721.

[128] Vojta M. Orbital-selective Mott transitions: Heavy fermions and beyond. *J. Low Temp. Phys.*, 2010, **161**(1-2):203.

[129] Zhang F C, Rice T M. Effective hamiltonian for the superconducting Cu oxides. *Phys. Rev. B*, 1988, **37**(7):3759.

[130] Zhang G M, Yang Y f, Zhang F C. Self-doped Mott insulator for parent compounds of nickelate superconductors. *Phys. Rev. B*, 2020, **101**(2):020501.

[131] Kotliar G, Savrasov S Y, Haule K, et al. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Rev. Mod. Phys.*, 2006, **78**(3):865.

[132] Bulla R, Hewson A C, Pruschke T. Numerical renormalization group calculations for the self-energy of the impurity Anderson model. *J. Phys. Condens. Matter*, 1998, **10**(37):8365.

[133] Pruschke T, Bulla R, Jarrell M. Low-energy scale of the periodic Anderson model. *Phys. Rev. B*, 2000, **61**(19):12799.

[134] Hu D, Dong J J, Yang Y f. Hybridization fluctuations in the half-filled periodic Anderson model. *Phys. Rev. B*, 2019, **100**(19):195133.

[135] Weber C, Haule K, Kotliar G. Optical weights and waterfalls in doped charge-transfer insulators: A local density approximation and dynamical mean-field theory study of $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. *Phys. Rev. B*, 2008, **78**(13):134519.

[136] Kohno M. Mott transition in the two-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **108**(7):076401.

[137] Jarrell M. Symmetric periodic Anderson model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*, 1995, **51**(12):7429.

[138] Shimizu Y, Sakai O, Hewson A C. The effects of band dispersion and interactions on the excitation gaps in the periodic Anderson model in infinite dimensions. *J. Phys. Soc. Japan*, 2000, **69**(6):1777.

[139] Mott N F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proc. Phys. Phys. Soc. Sect. A*, 1949, **62**(7):416.

[140] Brinkman W F, Rice T M. Application of Gutzwiller's variational method to the metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 1970, **2**(10):4302.

[141] Castellani C, Castro C D, Feinberg D, et al. New model hamiltonian for the metal-insulator transition. *Phys. Rev. Lett.*, 1979, **43**(26):1957.

[142] Rozenberg M J, Zhang X Y, Kotliar G. Mott-Hubbard transition in infinite dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, **69**(8):1236.

[143] Rozenberg M J, Kotliar G, Zhang X Y. Mott-Hubbard transition in infinite dimensions. II. *Phys. Rev. B*, 1994, **49**(15):10181.

[144] Kotliar G. Landau theory of the Mott transition in the fully frustrated Hubbard model in infinite dimensions. *Eur. Phy. J. B*, 1999, **11**(1):27.

[145] Kotliar G, Lange E, Rozenberg M J. Landau theory of the finite temperature Mott transition. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**(22):5180.

[146] Caffarel M, Krauth W. Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **72**(10):1545.

[147] Majumdar P, Krishnamurthy H R. Reentrant insulator-metal transition in the half-filled Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 1995, **52**(8):5479.

[148] Rozenberg M J, Kotliar G, Kajueter H, et al. Optical conductivity in Mott-Hubbard systems. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**(1):105.

[149] McWhan D B, Remeika J P, Rice T M, et al. Electronic specific heat of metallic Ti-doped V_2O_3. *Phys. Rev. Lett.*, 1971, **27**(14):941.

[150] Limelette P. Universality and critical behavior at the Mott transition. *Science*, 2003, **302**(5642):89.

[151] Huang L, Yang Y F, Wang L. Recommender engine for continuous-time quantum Monte Carlo methods. *Phys. Rev. E*, 2017, **95**(3):031301.

[152] Anderson P W, Yuval G. Exact results in the Kondo problem: Equivalence to a classical one-dimensional Coulomb gas. *Phys. Rev. Lett.*, 1969, **23**(2):89.

[153] Anderson P W, Yuval G, Hamann D R. Exact results in the Kondo problem. II. Scaling theory, qualitatively correct solution, and some newr esults on one-dimensional classical statistical models. *Phys. Rev. B*, 1970, **1**(11):4464.

[154] Anderson P W, Yuval G, Hamann D R. Scaling theory for the Kondo and one-dimensional Ising models. *Solid State Commun.*, 1970, **8**(13):1033.

[155] Schotte K D. Tomonaga's model and the Kondo problem. *Z. Phys.*, 1970, **230**(2):99.

[156] Blume M, Emery V J, Luther A. Spin-boson systems: one-dimensional equivalents and the Kondo problem. *Phys. Rev. Lett.*, 1970, **25**(7):450.

[157] Suzuki M. Relationship among exactly soluble models of critical phenomena. I. *Prog. Theor. Phys.*, 1971, **46**(5):1337.

[158] Suzuki M. Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1)-dimensional ising systems: equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations. *Prog. Theor. Phys.*, 1976, **56**(5):1454.

[159] Emery V J, Luther A. Low- temperature properties of the Kondo Hamiltonian. *Phys. Rev. B*, 1974, **9**(1):215.

[160] Chui S T, Lee P A. Equivalence of a one-dimensional fermion model and the two-dimensional Coulomb gas. *Phys. Rev. Lett.*, 1975, **35**(5):315.

[161] Chakravarty S, Hirsch J E. Approximate mapping of the two-impurity symmetric Anderson model in the local-moment regime to a classical problem. *Phys. Rev. B*, 1982, **25**(5):3273.

[162] Fannes M, Nachtergaele B. Translating the spin-boson model into a classical system. *J. Math. Phys.*, 1988, **29**(10):2288.

[163] Wang X, Brown D W, Campbell D K. Equivalence of the Holstein polaron to a one-dimensional classical gas. *Phys. Lett. A*, 1993, **181**(2):123.

[164] Novais E, Miranda E, Castro Neto A H, et al. Coulomb gas approach to the anisotropic one-dimensional Kondo lattice model at arbitrary filling. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**(17):174409.

[165] Shah N, Millis A J. Dissipative dynamics of an extended magnetic nanostructure: spin necklace in a metallic environment. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **91**(14):147204.

[166] Carleo G, Cirac I, Cranmer K, et al. Machine learning and the physical sciences. *Rev. Mod. Phys.*, 2019, **91**(4):045002.

[167] Wang Y, Feng Y, Cheng J G, et al. Spiral magnetic order and pressure-induced superconductivity in transition metal compounds. *Nat. Commun.*, 2016, **7**(1):13037.

[168] Carrasquilla J, Melko R G. Machine learning phases of matter. *Nat. Phys.*, 2017, **13**(5):431.

[169] Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 2017, **355**(6325):602.

[170] Choo K, Carleo G, Regnault N, et al. Symmetries and many-body excitations with neural-network quantum states. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, **121**(16):167204.

[171] Guo C, Jie Z, Lu W, et al. Matrix product operators for sequence-to-sequence learning. *Phys. Rev. E*, 2018, **98**(4):042114.

[172] Han Z Y, Wang J, Fan H, et al. Unsupervised generative modeling using matrix product states. *Phys. Rev. X*, **8**(3):031012.

[173] Huang L, Wang L. Accelerated Monte Carlo simulations with restricted Boltzmann machines. *Phys. Rev. B*, 2017, **95**(3):035105.

[174] Liu J, Shen H, Qi Y, et al. Self-learning Monte Carlo method and cumulative update in fermion systems. *Phys. Rev. B*, 2017, **95**(24):241104.

[175] Chen C, Xu X Y, Liu J, et al. Symmetry-enforced self-learning Monte Carlo method applied to the Holstein model. *Phys. Rev. B*, 2018, **98**(4):041102.

[176] Siepmann J I, Frenkel D. Configurational bias Monte Carlo: A new sampling scheme for flexible chains. *Mol. Phys.*, 1992, **75**(1):59.

个人简历

基本情况

胡丹青，男，重庆人，1991 年 10 月生，中国科学院物理研究所在读博士研究生。

教育情况

2009 年 09 月至 2013 年 6 月，四川大学，本科，专业：理论物理

2013 年 09 月至 2020 年 6 月，中国科学院物理研究所，硕博连读研究生，专业：理论物理

联系方式

Email: hudqmh@iphy.ac.cn

发表文章目录

[1] **Danqing Hu**, Ning-Hua Tong, and Yi-feng Yang*, Energy-scale cascade and correspondence between the Mott and Kondo lattice physics, arXiv:2002.12122 (2020).

[2] **Danqing Hu**, Jian-Jun Dong, Li Huang, Lei Wang*, and Yi-feng Yang*, Effective classical correspondence of the Mott transition, Phys. Rev. B **101**, 075111 (2020).

[3] **Danqing Hu**, Jian-Jun Dong, and Yi-feng Yang*, Hybridization fluctuations in the half-filled periodic Anderson model, Phys. Rev. B **100**, 195133 (2019).

[4] Neng Xie, **Danqing Hu**, and Yi-feng Yang* , Hybridization oscillation in the one-dimensional Kondo-Heisenberg model with Kondo holes, Sci. Rep. **7**, 11924 (2017). (共同第一作者)

[5] Min Liu, Yuanji Xu, **Danqing Hu**, Zhaoming Fu*, Ninghua Tong, Xiangrong Chen, Jianguang Cheng*, Wenhui Xie and Yi-feng Yang*, Symmetry-enforced heavy-fermion physics in the quadruple-perovskite $CaCu_3Ir_4O_{12}$, arXiv:1705.00846 (2017).

致　谢

首先，我由衷地感谢我的指导老师杨义峰研究员。在这七年的科研生活中，杨义峰老师在科研的各个方面对我进行了细致的指导。杨老师以独立的科研工作者为目标对我进行培养，帮助我养成良好的科研习惯，这让我深刻体会到了科研的乐趣。杨老师对科研有着自己独到的见解，并且有着非常的执着和热忱。他治学严谨，精益求精，深深感染着我。

我还要感谢几位老师：同宁华老师、王磊老师、付召明老师、刘瑜老师，他们都给了我许多指导和帮助。感谢在物理所期间与我共同生活和成长的同学和朋友，在这漫长的岁月里，有他们的相伴和帮助我才能够完成我的工作。

最后感谢我的家人对我的理解和支持。